

THÈSE

pour obtenir

le grade de : DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE SAINT-ÉTIENNE

Spécialité : IMAGE

par

Viet Dung TRAN

et intitulée

Reconstruction et segmentation d'image 3D de tomographie électronique par approche "problème inverse"

soutenue le 14 octobre 2013 devant la commission d'examen :

Président :

Dominique JEULIN Professeur, École Nat. Sup. des Mines, Paris

Rapporteurs :

Alain THOREL Directeur de Recherche, École Nat. Sup. des Mines, Paris

Laurent MUGNIER Maître de Recherche, ONERA, Paris

Directeur et co-directeurs de thèse :

Jean Marie BECKER Professeur, CPE, Lyon

Maxime MOREAUD Chef de projet, IFP Énergies nouvelles, Lyon

Éric THIÉBAUT Astronome, Centre de Recherche Astronomique, Lyon

Membre invité :

Loïc DENIS Maître de Conférences, Télécom, Saint-Étienne

Remerciements

En premier lieu, je tiens à adresser mes profonds remerciements à Monsieur Jean-Marie Becker, Monsieur Éric Thiébaud et Monsieur Maxime Moreaud, qui ont dirigé mes travaux de thèse. Leur disponibilité et leur grande pédagogie ont permis son aboutissement. Je les remercie pour leur sympathie et pour la confiance qu'ils ont su m'accorder dans la réalisation de ce travail.

Je suis également très reconnaissant envers Monsieur Alain Thorel, Monsieur Laurent Mugnier pour m'avoir fait l'honneur d'accepter d'être rapporteurs de mes travaux de thèse et Monsieur Dominique Jeulin et Monsieur Loïc Denis d'être membres du jury.

Un grand merci à Fabien Momey, François Cokelaer et Louis Thibon, pour toutes les discussions très enrichissantes ainsi que leur aide si précieuse.

Je tiens à remercier le département Caractérisation Matériaux de l'IFP Énergies nouvelles (IFPEn), et en particulier Anne-Sophie Gay, Loïc Sorbier, Anne-Lise Taleb, Veronique Lefebvre pour leur support concernant les acquisitions des données du MET.

Je tiens à remercier différents membres de l'équipe AIRI du CRAL qui m'ont rendu si agréable cette période de travail effectuée à l'Observatoire de Lyon.

Enfin, j'aimerais témoigner ma reconnaissance envers mes collègues de l'IFPEn, en particulier du département Contrôle Signal et Système (R113) pour les échanges et les bons moments passés ensemble pendant mes trois années de thèse.

Table des matières

Contexte	7
Introduction générale	9
1 Introduction	11
1.1 Tomographie	11
1.2 Principe du microscope électronique en transmission	14
1.3 La tomographie électronique	18
1.3.1 Défauts d’alignement de la série de projections	19
1.3.2 Nombre limité de projections	21
1.3.3 Caractéristique des volumes à reconstruire	23
1.4 État de l’art en reconstruction tomographique	24
1.4.1 Méthodes analytiques	24
1.4.2 Approches algébriques de reconstruction	28
1.4.3 Reconstruction avec méthode de l’état de l’art	37
1.4.4 Spécificité de la tomographie électronique	38
1.5 Conclusion	40
2 Méthode de reconstruction par optimisation alternée	43
2.1 État de l’art du recalage	43
2.1.1 Alignement par suivi de points de repère	43
2.1.2 Alignement de proche en proche sans marqueurs	44
2.1.3 Détermination de l’axe de tilt	48
2.1.4 Alignement intégré au processus de reconstruction	52
2.2 Pré-recalage des projections	53
2.2.1 Recalage d’une paire d’images par optimisation	53
2.2.2 Transformation RST (Rotation Scale Translation)	54
2.2.3 Recalage de proche en proche	56
2.3 Optimisation alternée	57
2.4 Traitement des défauts de focalisation	58

2.5	Validation	62
2.5.1	Recalage d'une paire d'images par optimisation	62
2.5.2	Recalage d'une série de projections réelles	64
2.5.3	Recalage fin par optimisation alternée	66
2.6	Conclusion	71
3	Techniques avancées	73
3.1	Amélioration de l'optimisation alternée	73
3.1.1	Optimisation alternée et alignement alterné	74
3.1.2	Validation	78
3.2	Prise en compte des franges de Fresnel dans la reconstruction	89
3.2.1	Méthode	89
3.2.2	Validation	92
3.3	Méthode dégradée et implantation orientée GPU	93
3.3.1	Opérateurs de projection et rétro-projection simplifiés	93
3.3.2	Méthode SIRT simplifiée	95
3.4	Segmentation du volume reconstruit	96
3.4.1	Critère distance de projection	96
3.4.2	Segmentation basée sur une optimisation globale	97
3.4.3	Application pour la nanotomographie	98
3.4.4	Validation	98
3.5	Conclusion	101
4	Conclusion générale	103
A	Relation entre la méthode présentée et la maximisation de corrélation	105
B	Quelque notions de base de morphologie mathématique	107
C	SIRT sur Architecture GPU	111
	Bibliographie	122

Contexte

Ce travail de thèse a été réalisé au sein du département Contrôle Signal et Système (R113) dans la direction Technologie, Informatique et Mathématiques appliquées de l'IFP Énergies nouvelles (IFPEn).

Cette direction effectue des travaux de R&D qui s'intègrent naturellement aux thématiques scientifiques de l'IFPEn. L'évolution de ces dernières se caractérise par une complexification des modèles, avec des couplages multiphysiques, des données de plus en plus nombreuses et volumineuses à partager entre différentes applications. Poussée par la sévèrisation des normes environnementales, elle se caractérise aussi par la nécessité de maîtriser les procédés (raffinage et combustion moteur) dans des zones limites de fonctionnement à pollution minimale, et par celle de pouvoir gérer et commander des systèmes technologiques complexes (véhicules propres et économes).

Ce sujet de thèse s'inscrit dans la thématique de maîtrise du procédé de raffinage permettant de produire des carburants de moins en moins polluants. Une meilleure compréhension de la morphologie des supports de catalyseurs¹ en est la condition primordiale. Cette morphologie peut être fournie par un outil de reconstruction tomographique, ce qui constitue l'objectif principal de cette thèse.

Ce travail de thèse est le fruit d'une collaboration entre :

- le Centre de Recherche Astrophysique de Lyon (CRAL) - Observatoire de Lyon (Unité Mixte de Recherche CNRS / Université Claude Bernard Lyon 1 / ENS-Lyon ; UMR5574) ;
- le Laboratoire Hubert Curien (LaHC) (Unité Mixte de Recherche CNRS / Université Jean Monnet de Saint-Étienne ; UMR5516) ;
- l'École supérieure de Chimie Physique Électronique de Lyon (CPE-Lyon) ;
- IFP Énergies nouvelles ;

Enfin, la direction de cette thèse a été assurée par Jean Marie Becker (enseignant chercheur à CPE-Lyon, rattaché au LaHC). Les aspects théoriques ont bénéficié de l'encadrement d'Éric Thiébaud (chercheur au CRAL) et de Maxime Moreaud (ingénieur R&D en traitement d'images, chef de projet à l'IFPEn), ainsi qu'une collaboration très enrichissante avec Fabien Momey

1. Un catalyseur est une substance qui modifie la vitesse d'une réaction chimique, il participe à la réaction mais il ne fait partie ni des produits, ni des réactifs, et donc n'apparaît pas dans l'équation-bilan.

(ancien doctorant au laboratoire LaHC et au CRAL) et Loïc Denis (post-doctorant au CRAL , et à présent maître de conférences à TELECOM Saint-Étienne).



Introduction générale

Dans le domaine du raffinage, les contraintes de production de plus en plus nombreuses et sévères (efficacité, qualité, environnement, etc...) poussent les chercheurs à améliorer les procédés de raffinage. Pour cela, l'étude précise des caractéristiques telles que la morphologie, la surface spécifique, etc...des supports de catalyseurs, des particules de phases actives imprégnées sur ces supports sont nécessaires.

Pour obtenir ces informations, l'imagerie en deux dimensions par microscope électronique (MET², MEB³) est couramment utilisée. Cependant, elle présente des inconvénients : l'image du MET est basée sur l'intégration en épaisseur. Les informations étant moyennées, il est difficile de caractériser la porosité, la connectivité du matériau ou la localisation de la phase active en son sein. L'image du MEB donne des informations en surface sur la distribution de différents composants du support, mais la taille des pores du support ou la caractérisation fine de la phase active à l'intérieur du support restent toujours inaccessibles. Face à ces difficultés, une des techniques d'acquisition utilisées est la tomographie électronique (ou nanotomographie). Des volumes 3D sont reconstruits à partir de séries de projections sous différents angles obtenues par MET. Cette technique permet d'obtenir une réelle information tridimensionnelle à l'échelle du nanomètre.

Les projections sont obtenues en utilisant les possibilités d'inclinaison du porte-objet d'un MET. À cause des limitations mécaniques de ce porte-objet (proximité avec les lentilles magnétiques et déplacement nanométrique), on ne peut acquérir qu'un nombre assez restreint de projections et celles-ci dans un intervalle angulaire fixe. D'autre part, l'inclinaison du porte-objet est accompagnée d'un déplacement mécanique nanométrique non parfaitement contrôlé. Ce déplacement doit être corrigé après l'acquisition par un alignement des projections suivant le même axe 3D de rotation. Cette étape est un pré-requis à la reconstruction tomographique.

L'objectif de cette thèse est de développer une méthode de reconstruction tomographique par approche "problème inverse" permettant d'aligner des projections et de corriger les lacunes de l'acquisition de l'objet observé en introduisant de façon pertinente des informations *a priori*. Ces informations sont basées à la fois sur la physique de l'acquisition (nature physique des images MET, géométrie et limitation spécifique de l'acquisition des projections, etc...) et sur

2. Microscope électronique en transmission.

3. Microscope électronique à balayage.

la nature des objets à reconstruire (nombre et répartition des phases, critères morphologiques de type de connexité, etc...). Cet objectif est réalisé par le choix et la mise en œuvre d'une méthode d'optimisation qui permet de gérer le nombre très important de paramètres à estimer ainsi que leurs contraintes particulières. Il consiste aussi à incorporer de manière exploitable les *a priori* physiques en tant que contraintes sur les paramètres.

Plan de la thèse

Le chapitre 1 présente le principe de la tomographie puis celui de la nanotomographie. Les principaux défauts de cette dernière technique ainsi que la caractéristique de l'objet étudié sont rappelés. Nous décrivons ensuite un état de l'art en reconstruction tomographique. Enfin, nous reformulons le problème de la nanotomographie en tant que problème inverse permettant simultanément d'effectuer la reconstruction tomographique et de corriger les défauts d'acquisition. Nous proposons de résoudre ce problème inverse par la méthode d'*optimisation alternée*, qui est le sujet du chapitre 2.

Ce chapitre commence par un état de l'art des principales techniques d'alignement des images de projections. Nous présentons ensuite notre méthode permettant de recalibrer deux images par optimisation ; nous détaillons également comment appliquer cette méthode pour pré-aligner une série de projections (recalage de proche en proche). Les projections pré-recalées sont employées pour initialiser le processus d'*optimisation alternée* permettant à la fois de recalibrer finement l'axe de tilt, les projections et d'effectuer la reconstruction tomographique. Les validations sur des données de simulation et des projections réelles de différents supports de catalyseur prouvent que ce processus est une bonne approche pour la nanotomographie. Enfin, une approche de déconvolution "myope" est également proposée pour restaurer les projections floues en raison d'une mauvaise mise au point du MET.

Le chapitre 3 présente un nouveau schéma d'optimisation, appelé *optimisation alternée et alignement alterné*, permettant d'améliorer considérablement la méthode d'*optimisation alternée*. Notre modèle de projection basé sur la rotation d'image est ensuite présenté. Il permet d'implanter relativement simplement un algorithme de reconstruction de type SIRT. De plus, chacune des étapes de cet algorithme peut être parallélisée en utilisant notre approche afin d'utiliser des processeurs graphiques (GPUs). Nous décrivons également dans ce chapitre notre méthode pour prendre en compte des franges de Fresnel présentes sur les images de projections et qui dégradent la qualité du volume reconstruit. Enfin, une nouvelle méthode de segmentation du volume reconstruit est fournie. Elle est validée par des tests sur des données de simulation et des données réelles.

Chapitre 1

Introduction

1.1 Tomographie

Le terme "tomographie" désigne l'ensemble des méthodes de reconstruction exactes ou - le plus souvent - approchées de l'intérieur d'un objet (2D ou 3D) à partir de mesures effectuées à l'extérieur de cet objet (*cf.* Fig. 1.1). Souvent, ces mesures sont effectuées par l'intermédiaire d'un capteur avec différents angles de vue autour de l'objet en question.

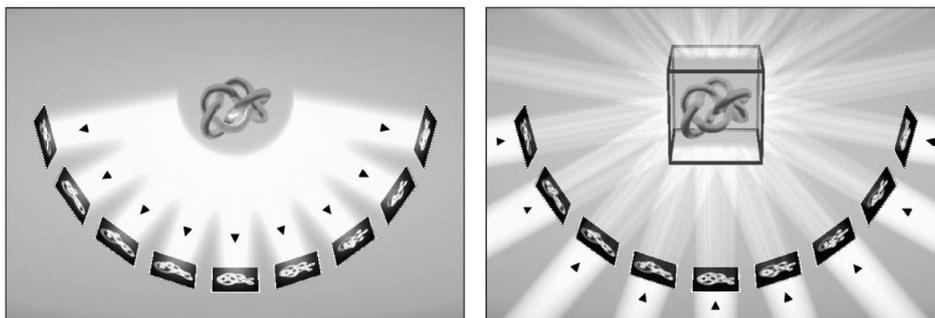


FIGURE 1.1 – Schéma de principe de la tomographie. À gauche : acquisition de projections autour d'un objet. À droite : utilisation des projections pour reconstruire l'objet (par rétro-projection par exemple). Source : [Sali *et al.* (2003)].

La base théorique mathématique de la reconstruction d'un objet à partir de la connaissance de ses projections a été énoncée par Radon [Radon (1917)]. La transformée de Radon directe décrit l'acquisition d'une droite de projection (*cf.* Fig. 1.2). C'est une transformation linéaire transformant une fonction 2D définie par $f(x, y)$ en une projection 1D suivant un angle θ et un module t donné :

$$p_{\theta}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \delta(t - x \cos \theta - y \sin \theta) dx dy \quad (1.1)$$

où θ et t sont respectivement les coordonnées angulaire et radiale de la droite de projection

$p_\theta(t)$, et $\delta(\cdot)$ l'impulsion de Dirac. La valeur de $p_\theta(t)$ est la somme de l'intensité de tous les points traversés par la droite dans le milieu.

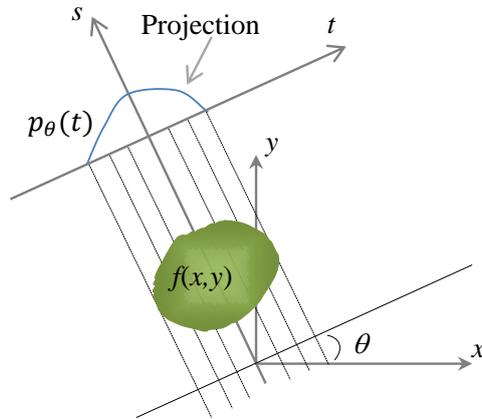


FIGURE 1.2 – La donnée de l'angle θ .

Si nous représentons les valeurs de $p_\theta(t)$ dans un plan de coordonnées θ et t , on obtient ce que l'on appelle un sinogramme (cf. Fig. 1.3).

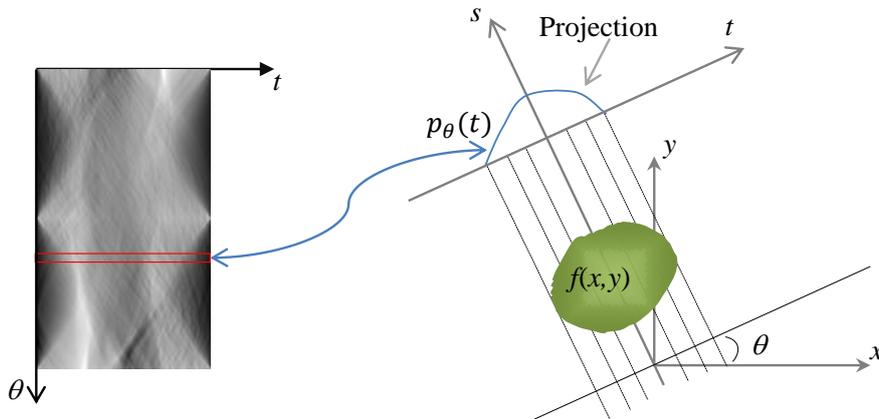


FIGURE 1.3 – Une direction de projection à l'angle θ correspond à une ligne du sinogramme.

L'objectif de la tomographie est de calculer une estimation $f^+(x,y)$ de $f(x,y)$ à partir des projections mesurées. On appelle $f^+(x,y)$ l'image reconstruite ou le tomogramme.

Un des principes fondamentaux de la tomographie est le théorème de la coupe centrale (*Fourier Slice Theorem*) [De Rosier et Klug (1968)], [Natterer (1985)], [Crowther (1971)]. Il énonce que la transformée de Fourier d'une projection 2D d'un objet 3D est une section centrale de la transformée de Fourier de l'objet. Ce théorème permet d'envisager la reconstruction tomographique de manière directe à l'aide de la transformée de Fourier inverse. Plus précisément, en 2D, le théorème de la coupe centrale s'énonce par la relation suivante : la transformée de

Fourier d'une projection d'angle θ correspond à la ligne de la transformée de Fourier de l'image $f(x, y)$ passant par l'origine faisant un angle θ avec l'axe des abscisses (cf. Fig. 1.4).

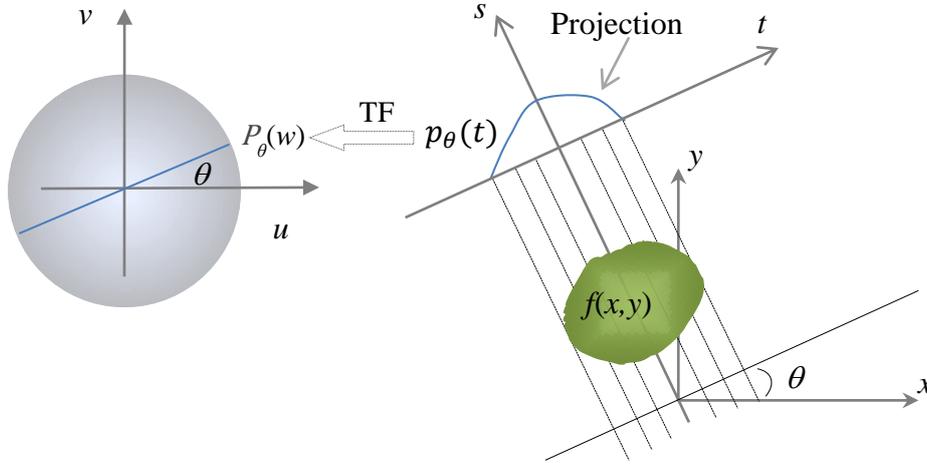


FIGURE 1.4 – Illustration du théorème coupe-projection lié à la transformée de Radon 2D.

Nous pouvons écrire la transformée de Fourier 2D de $f(x, y)$ sous la forme :

$$F(u, v) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) e^{-2i\pi(ux+vy)} dx dy \quad (1.2)$$

Et la transformée de Fourier de la projection à l'angle θ :

$$P_{\theta}(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{\theta}(t) e^{-2i\pi wt} dt \quad (1.3)$$

Considérons le système de coordonnées (t, s) associé au faisceau d'électron. Les relations permettant de passer de (x, y) à (t, s) sont :

$$\begin{cases} t = x \cos \theta + y \sin \theta \\ s = -x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases} \quad (1.4)$$

Dans le repère (t, s) , la projection de f à la distance t et l'angle θ , peut être écrite sous la forme :

$$p_{\theta}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, s) ds \quad (1.5)$$

suivant l'équation 1.3, sa transformée de Fourier devient :

$$\begin{aligned} P_{\theta}(w) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(t, s) ds \right] e^{-2i\pi wt} dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, s) e^{-2i\pi wt} ds dt \end{aligned} \quad (1.6)$$

Par changement de variables en coordonnées (x, y) , nous obtenons :

$$\begin{aligned} P_\theta(w) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) e^{-2i\pi w(x \cos \theta + y \sin \theta)} dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) e^{-2i\pi(xw \cos \theta + yw \sin \theta)} dx dy \end{aligned} \quad (1.7)$$

Si nous changeons, $u = w \cos \theta$ et $v = w \sin \theta$, les membres de droite des équations 1.2 et 1.7 sont identiques. Nous avons donc la relation :

$$P_\theta(w) = F(u, v) = F(w \cos \theta, w \sin \theta) \quad (1.8)$$

Ce principe est utilisé pour remplir l'espace de Fourier ; ainsi le tomogramme $f^+(x, y)$ est obtenu par transformée de Fourier 2D inverse.

L'impact de la tomographie dans le domaine médical a été révolutionnaire en permettant aux médecins de visualiser les organes internes avec une haute précision. La première application médicale a utilisé des rayons X pour former des images de tissus en fonction de leur coefficient d'atténuation aux rayons X. Plus récemment, l'imagerie médicale par tomographie s'est élargie à des projections obtenues à l'aide de radio-isotopes, à l'utilisation de la résonance magnétique, etc...

Il existe de nombreuses applications d'imagerie non-médicale basées sur des méthodes de reconstruction tomographique. Par exemple, cette méthodologie est appliquée à la cartographie des ressources souterraines en géophysique pour le forage ; elle est également présente en astrophysique, avec l'imagerie Zeeman-Doppler, permettant de reconstruire le champ magnétique des étoiles ; enfin la tomographie électronique permet d'obtenir une information tridimensionnelle d'un objet à l'échelle du nanomètre à l'aide d'un microscope électronique en transmission (MET).

Dans le paragraphe suivant, nous présenterons le principe du MET (*cf.* Fig. 1.5), qui est le dispositif utilisé pour acquérir les projections en tomographie électronique. Celles-ci seront employées ensuite dans la reconstruction tomographique.

1.2 Principe du microscope électronique en transmission

Le MET (ou TEM en anglais pour Transmission Electron Microscopy) est une technique de microscopie puissante de caractérisation. Il permet d'obtenir des informations à l'échelle de quelques nanomètres en microscopie à basse résolution et de quelques angströms en microscopie à haute résolution.

Dans un MET, des électrons de haute énergie (100 keV ou plus) traversent l'échantillon et permettent d'en découvrir l'intérieur à partir de coupes fines typiquement de l'ordre de la cen-



FIGURE 1.5 – Un microscope électronique en transmission JEOL 2100F.

taine de nanomètre. Un faisceau d'électrons parallèle est émis par un canon à électrons, focalisé sur la préparation à l'aide de lentilles électromagnétiques. L'échantillon disperse les électrons qui le traversent et le faisceau sortant est focalisé à nouveau par des lentilles électromagnétiques pour former une image visible agrandie de l'échantillon soit sur un écran fluorescent, soit sur un capteur.

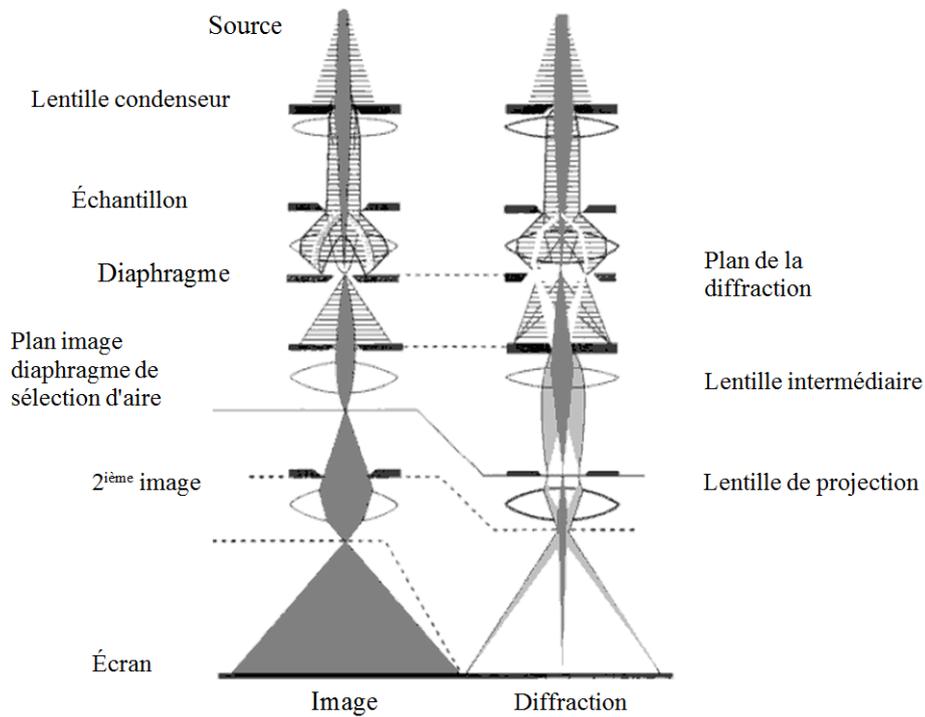


FIGURE 1.6 – Schéma du trajet d'un faisceau d'électrons à travers le système de lentilles d'un MET dans le mode image et le mode diffraction. Source : [Ayache *et al.* (2007)].

Il existe deux modes d'observations principaux en MET (*cf.* Fig. 1.6). Ce sont le mode image et le mode diffraction [[Girleanu \(2010\)](#)].

Mode image :

- **Champ clair** : Le diaphragme est petit et laisse traverser seulement le faisceau transmis contenant des électrons non-diffractés. Ces électrons vont former une image sur l'écran. Dans une telle image, les zones peu denses ou de numéro atomique faible laissant passer fortement le faisceau apparaissent très brillantes tandis que les zones de l'échantillon denses ou de numéro atomique élevé laissent peu passer ces électrons et apparaissent sombres (*cf.* Fig. 1.7 - gauche);
- **Champ sombre** : Le diaphragme sélectionne un ou plusieurs faisceaux diffractés, mais pas le faisceau transmis. Dans ce type d'image, les régions brillantes désignent des régions cristallines diffractantes (*cf.* Fig. 1.7 - droite);

Mode diffraction : Ce mode consiste à régler les lentilles (diffraction et intermédiaire) de façon à ce que l'écran d'observation, ou le capteur, soit conjugué du plan focal « image » de la lentille objectif; on observe alors un plan de diffraction sur l'écran.

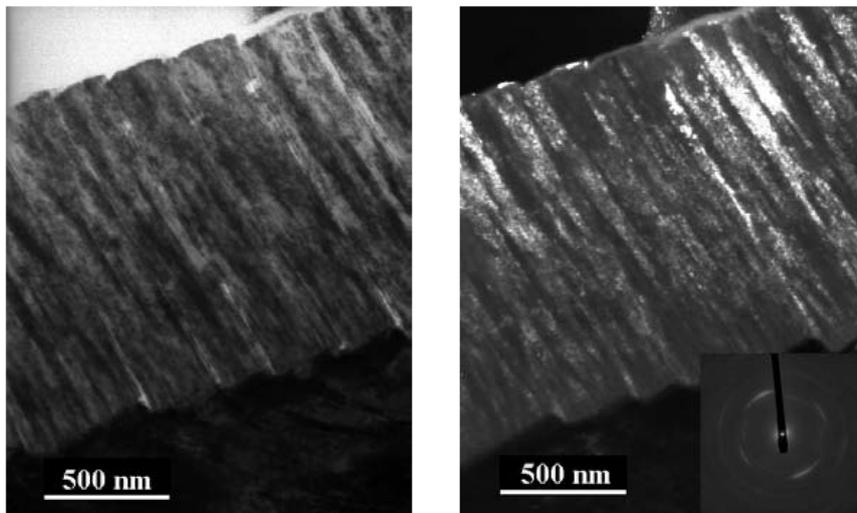


FIGURE 1.7 – Illustration des types d'images obtenues avec une section transverse d'un film mince de TiN. (gauche) image en champ clair, faisant apparaître des structures lamellaires; (droite) image en champ sombre : seule une partie des électrons, correspondant à une orientation de diffraction donnée, est utilisée pour former l'image. Source : [[Girleanu \(2010\)](#)].

Pour simplifier, les images en champ clair permettent d'observer la morphologie de densité des couches tandis que les images en champ sombre donnent des informations sur la distribution spatiale des grains possédant une orientation donnée.

Phénomènes de diffusion dans le volume d'échantillon et notion de contraste

La formation d'une image en MET est due au phénomène de diffusion des électrons primaires dans un volume d'échantillon. Lorsqu'un électron de haute énergie traverse un échantillon, il interagit avec la matière. Il existe fondamentalement deux mécanismes de diffusion (*cf.* Fig. 1.8) :

- *Élastique* : C'est typiquement le cas lorsque les électrons interagissent avec les noyaux et subissent une interaction attractive (pas de changement d'énergie) et sont par conséquent fortement déviés.
- *Inélastique* : Les électrons qui traversent le nuage des orbitales électroniques interagissent avec des électrons liés aux atomes, et peuvent par conséquent leur communiquer de l'énergie (l'électron incident perd de l'énergie). Cette énergie permet à l'électron de la cible de changer de niveau énergétique (*cf.* Fig. 1.8 - droite). La déviation angulaire des électrons est alors plus faible que dans le cas de la diffusion élastique.

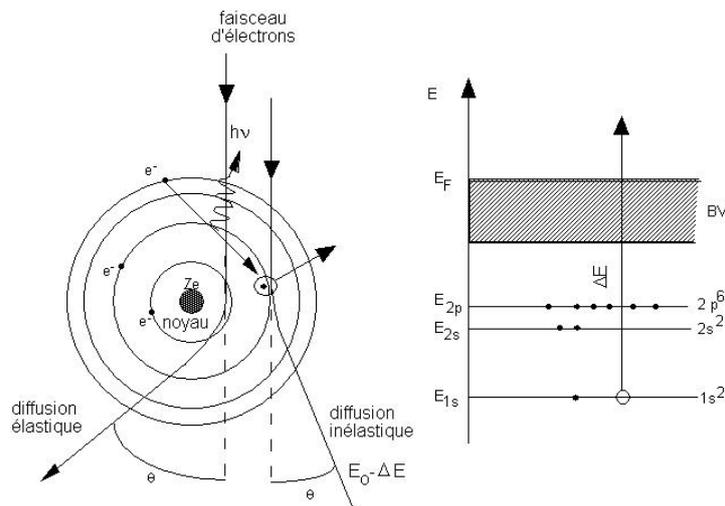


FIGURE 1.8 – (gauche) Diffusions élastique et inélastique entre un électron incident de haute énergie et un atome ; (droite) Niveaux énergétiques concernés par une excitation électronique avec perte d'énergie correspondante subie par l'électron incident de haute énergie. Source : [Colliex (1996)].

Notons que l'épaisseur de l'échantillon est suffisamment faible (de l'ordre de la centaine de nanomètre) pour que le nombre d'interactions soit limité. Ainsi, les électrons incidents après avoir traversé l'échantillon se propagent dans différentes directions à l'intérieur d'un cône de diffusion (*cf.* Fig.1.9).

En mode image (champ clair), l'utilisation du diaphragme d'objectif est indispensable pour éliminer les électrons diffusés élastiquement. Il permet de discriminer les électrons en fonction de la nature des atomes traversés, ou du nombre d'atomes traversés et par conséquent de l'épaisseur locale [Colliex (1996)].

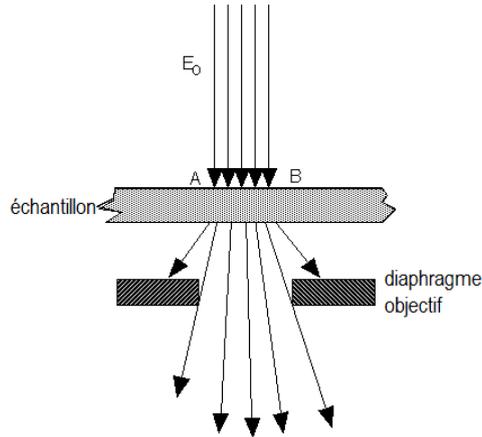


FIGURE 1.9 – Origine du contraste dit d’absorption introduit par un diaphragme à la sortie de l’échantillon. Source : [Colliex (1996)].

Comme nous l’avons vu, l’intensité d’un pixel dans une image en champ clair dépend de la densité locale et du numéro atomique du constituant. La fraction d’électrons n rassemblée en un pixel est donnée par [Hawkes (2006)] :

$$n = n_0 \cdot \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_e}{\mathcal{E}}\right) \quad (1.9)$$

où \mathcal{E}_e est l’épaisseur massique (produit de la densité ρ et de l’épaisseur e).

$$\mathcal{E} = \frac{1}{N \cdot \sigma_{bf}} \quad (N : \text{nombre d’Avogadro/numéro atomique ; } \sigma_{bf} : \text{section efficace de diffusion}).$$

1.3 La tomographie électronique

Un grand nombre d’applications de la microscopie électronique consistent à fournir des interprétations géométriques des images à des fins d’analyses qualitatives ou quantitatives. Ces analyses se rapportent généralement à des distances, des tailles ou un nombre de particules, etc... Les natures précises des milieux traversés par les électrons n’ont en général pas besoin d’être connues. Cependant, dans certains domaines comme l’étude de la structure des virus, l’étude de l’architecture supramoléculaire des cellules, ou encore l’analyse de forme de nanoparticules, des mesures des images dans leur intégralité sont nécessaires. Pour ces applications, nous cherchons à former une reconstruction en trois dimensions (3D) de l’objet.

Une technique permettant l’acquisition de ce type de données est la tomographie électronique. Son principe consiste à reconstruire un volume tridimensionnel d’un objet à partir des projections acquises par un MET. Ces projections contiennent toute l’information volumique projetée sur un plan, en inclinant le porte objet du microscope selon différents angles (on parle d’"angles de tilt") autour d’un axe unique perpendiculairement au faisceau d’électrons. Une image est prise pour chaque position angulaire (*cf.* Fig. 1.10).

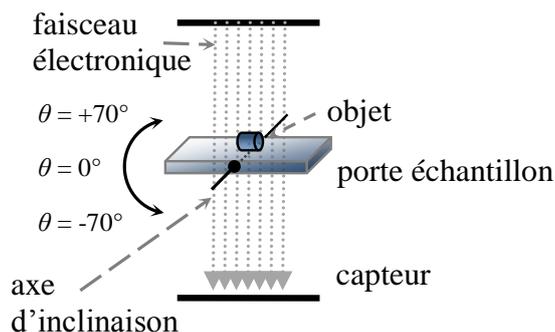


FIGURE 1.10 – Géométrie d’acquisition des projections en tomographie électronique. Le faisceau électronique est parallèle, sa direction est fixe. Le porte-échantillon est incliné autour d’un axe unique perpendiculaire au faisceau.

Comme nous l’avons vu précédemment lors de la description du MET, la géométrie d’acquisition est parallèle. Le faisceau d’électrons traversant l’échantillon est rectiligne. La reconstruction conceptuellement la plus simple peut être réalisée par plans de coupes successives¹, puis le volume reconstruit final est obtenu par superposition des coupes reconstruites. La résolution finale de l’objet reconstruit dépend essentiellement de l’alignement des projections (*cf.* Section 1.3.1) et du nombre de projections acquises (*cf.* Section 1.3.2).

1.3.1 Défauts d’alignement de la série de projections

Lorsqu’on incline le porte objet d’un angle de tilt au suivant, l’échantillon se déplace dans le champ d’observation et dans le plan de mise au point à cause de la précision mécanique limitée du porte-objet (*cf.* Fig. 1.11). Les MET actuels corrigent une partie de ces déplacements à l’aide d’une table de calibration. Cependant, ces corrections de l’ordre de quelques nanomètres ne sont pas suffisantes. Afin d’effectuer une reconstruction tomographique, ces déplacements doivent être corrigés parfaitement.

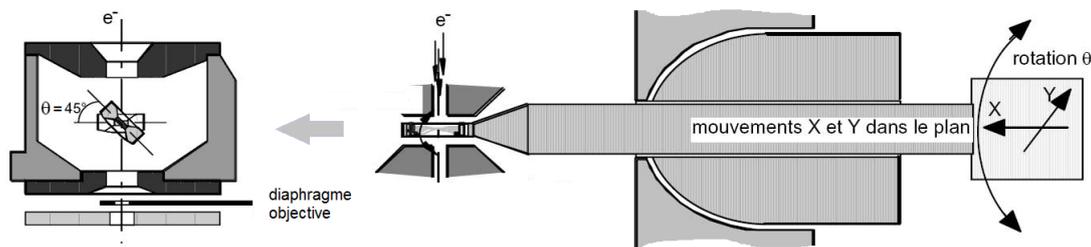


FIGURE 1.11 – Représentation simplifiée du porte-échantillon d’un MET, inspirée de Colliex [Colliex (1996)].

Nous pouvons considérer un système où, en choisissant judicieusement les axes (2 axes alignés avec les pixels du détecteur et le 3ème dans la direction normale, voir la figure 1.12), les

1. Reconstruire des images en coupes transversales de l’objet étudié.

déplacements suivant (OX, OY) correspondent à une translation de la projection (*cf.* Fig. 1.13) ; et ceux suivant la direction OZ affectent le grandissement et la mise au point de la projection (*cf.* Fig. 1.14). La rotation autour de OZ correspond à une rotation de la projection dans le plan du détecteur.

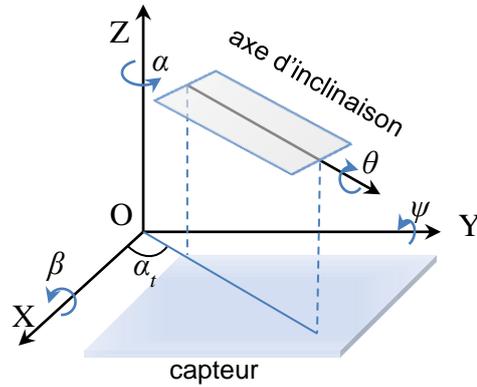
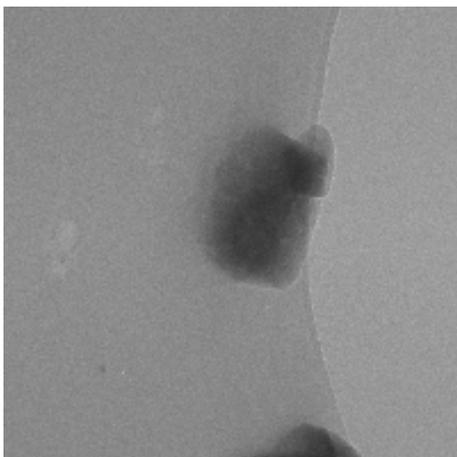
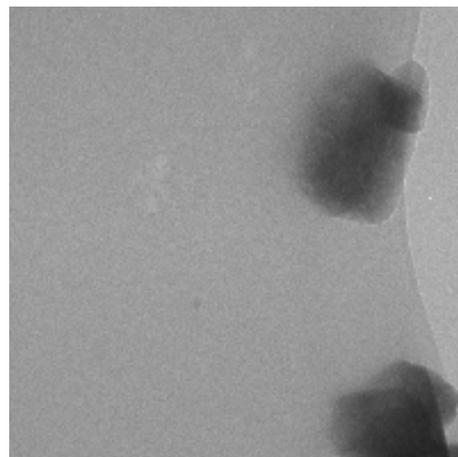


FIGURE 1.12 – Schéma de la géométrie d'inclinaison du porte-objet : (X, Y, Z) système de coordonnées fixe. Les axes OX, OY sont parallèles aux pixels du détecteur. OZ est parallèle à l'axe optique. Le porte-échantillon est incliné autour de l'axe d'inclinaison avec l'angle θ . En raison de la précision mécanique limitée, le porte-échantillon peut être décalé de X_t, Y_t, Z_t et légèrement incliné de $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$ (le long et autour de X, Y, Z respectivement).



(a) $\theta = 45^\circ$



(b) $\theta = 46^\circ$

FIGURE 1.13 – L'objet observé (un support catalyseur de zéolithe, 256×256 , $6,64 \text{ nm/pixel}$) est déplacé entre deux projections successives.

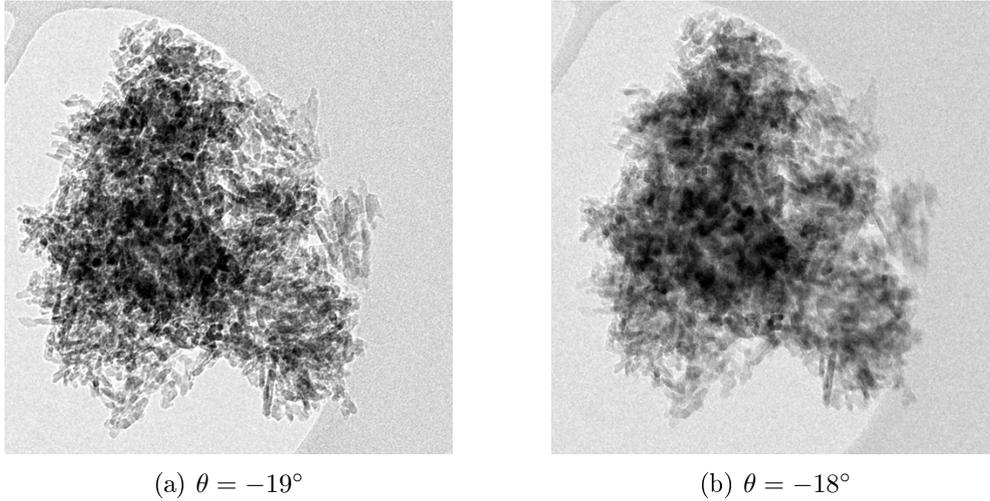


FIGURE 1.14 – Deux projections successives de fibrilles autoclavées (512×512 , $0,66 \text{ nm/pixel}$).
 (b) La projection est floue car le porte-objet s'est légèrement déplacé suivant l'axe optique.

1.3.2 Nombre limité de projections

Concernant la mise en œuvre de la tomographie et du théorème de la coupe centrale, la qualité de la reconstruction sera d'autant plus élevée que l'intervalle balayé sera grand (idéalement entre -90° et $+90^\circ$) et que l'incrément sera faible².

En pratique, l'intervalle angulaire balayé n'est jamais complet³ (typiquement de -70° à $+70^\circ$ par incrément de 1°). Il en découle une zone "aveugle" importante qui peut être visualisée dans l'espace de Fourier de l'objet (*cf.* Fig. 1.15).

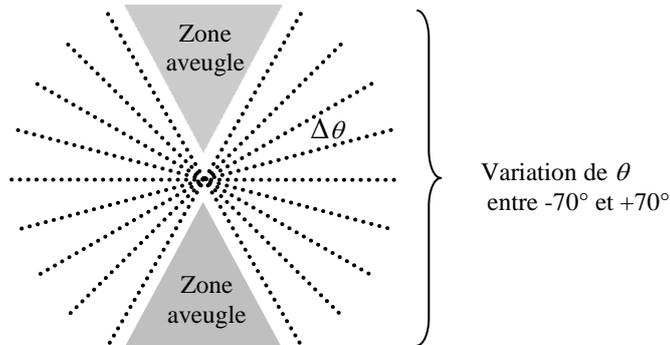


FIGURE 1.15 – Illustration du nombre limité de projections en tomographie électronique.

L'influence de cette zone induit un manque d'information dans la reconstruction, qui se traduit par une perte de résolution et des artefacts d'épandage en étoile dûs aux effets d'interpolation (*cf.* Fig. 1.16).

2. Donc le nombre de projections correspondant aux différentes orientations sera élevé.

3. Parce que l'espace entre les lentilles magnétiques n'autorise pas un grand angle de tilt. En outre l'épaisseur du port d'objet va augmenter considérablement pour un angle supérieur à 70° .

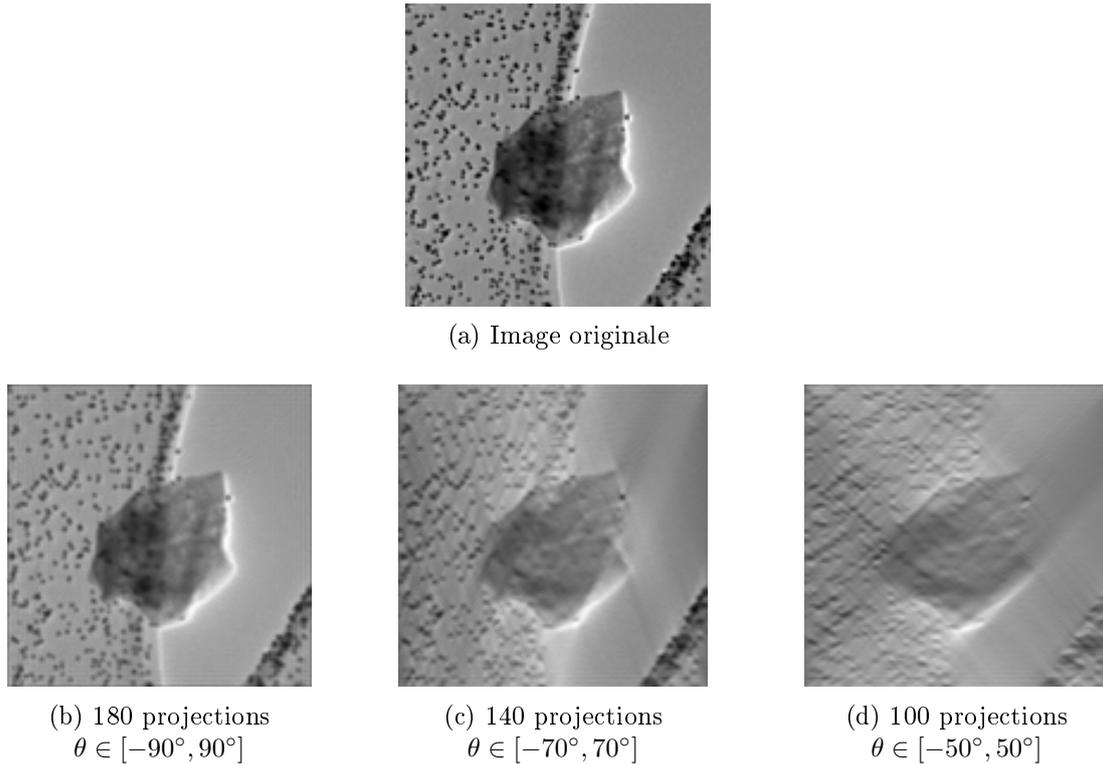


FIGURE 1.16 – (b-d) Images reconstruites présentant des artefacts d'épandage en étoile. Nous avons effectué ces reconstructions par rétroprojection filtrée (FBP) en utilisant des projections simulées de l'image originale (a) ; avec des intervalles angulaires différents et un pas angulaire de 1° .

Résolution spatiale du tomogramme

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que l'intervalle angulaire exerçait une importante influence sur la qualité (résolution) de l'image reconstruite (tomogramme). Dans le cas où les projections sont parfaitement alignées, cette résolution dépend du nombre de projections (n_θ), de l'intervalle angulaire balayé (θ_{\max}) et de la dimension latérale du volume reconstruit (D). Elle est différente (anisotrope) suivant les trois axes du volume reconstruit. On suppose que l'axe de tilt est parallèle à l'axe OX et le faisceau d'électrons est parallèle à l'axe OZ . Les bords du volume reconstruit sont donc parallèles aux trois axes OX, OY, OZ , comme dans la figure 1.17. Ainsi, il est possible de définir la résolution du volume reconstruit suivant trois plans [Midgley *et al.* (2003)] :

- XY : la résolution est égale à la résolution des projections 2D initiales.
- XZ : la résolution est définie comme $\pi D/n_\theta$.
- ZY : la résolution est dégradée d'un facteur e_{yz} par rapport celle suivant XZ. Ce facteur est équivalent à :

$$e_{yz} = \sqrt{\frac{\theta_{\max} + \sin \theta_{\max} \cos \theta_{\max}}{\theta_{\max} - \sin \theta_{\max} \cos \theta_{\max}}} \quad (1.10)$$

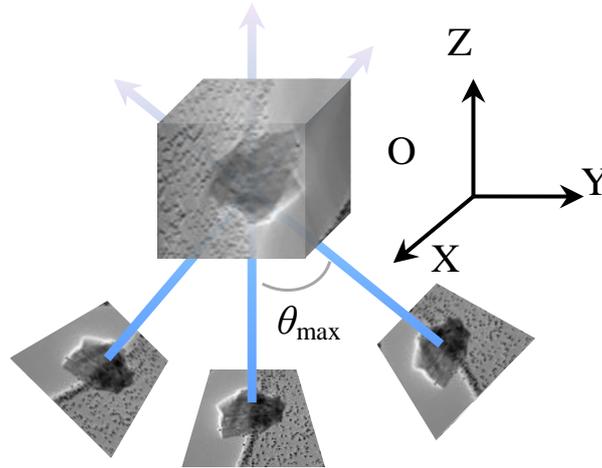


FIGURE 1.17 – Schématisation de la reconstruction d'un volume. L'axe de tilt est parallèle à l'axe OX , l'axe optique du microscope est parallèle à l'axe OZ .

1.3.3 Caractéristique des volumes à reconstruire

En tomographie électronique, nous nous intéressons à l'information morphologique d'objet et non à la densité des régions reconstruites comme c'est le cas en tomographie médicale. Pour un objet à reconstruire, nous connaissons a priori son nombre de phases (dans notre cas d'étude, ce nombre est limité à 3), l'intensité de chaque phase est supposé constant (cela signifie que l'objet est formé par des régions dont le niveau de gris est constant par morceaux et que ces régions ne présentent pas d'aspect texturé). Ces caractéristiques sont schématisées dans la figure 1.18.

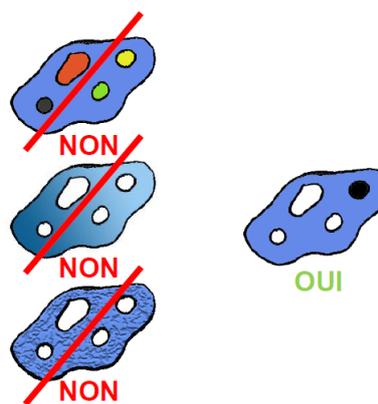


FIGURE 1.18 – Les caractéristiques des objets que nous étudions : nombre de phases limité à 3, densités des phases constantes, pas de texture.

1.4 État de l'art en reconstruction tomographique

Dans cette section, nous allons évoquer les méthodes de reconstruction les plus couramment utilisées en tomographie électronique. En général, il y a deux grandes familles de méthodes de reconstruction tomographique. L'une est l'ensemble des *algorithmes analytiques*, basées sur l'inversion directe des données. L'autre, est l'ensemble des *méthodes algébriques* (ou itératives), basés sur l'approche inverse, qui cherche à reconstruire l'objet de manière itérative par l'optimisation d'un critère définissant un certain compromis entre la fidélité aux données et des contraintes a priori.

Nous abordons dans le paragraphe suivant les principales méthodes de reconstruction analytiques, en précisant leurs points forts et leurs faiblesses.

1.4.1 Méthodes analytiques

1.4.1.1 Rétroprojection directe

La rétroprojection directe est la méthode la plus simple que l'on peut utiliser. Elle consiste à superposer en chaque point de l'objet du plan de coupe considéré les contributions de chaque rayon d'intégration passant par le point (x, y) . L'estimée du volume $f(x, y)$ est donc obtenue à partir de ces transformées de Radon, selon la relation :

$$f(x, y) = \int_0^\pi p_\theta(t)|_{t=x \cos \theta + y \sin \theta} d\theta \quad (1.11)$$

La formule dans l'espace discret est :

$$f(x, y) = \sum_{k=1}^{n_\theta} p_{\theta_k} \Delta\theta \quad (1.12)$$

où n_θ est le nombre total de projections et $\Delta\theta$ est le pas angulaire entre deux projections successives.

Cette méthode ne fournit pas une inversion exacte du problème. Des valeurs non nulles sont en effet générées à l'extérieur des objets. Ces défauts sont appelés artefacts en étoile (*cf.* Fig. 1.19 et Fig. 1.20b). Ces artefacts provoquent une perte de contraste. Nous pouvons corriger ce défaut en utilisant la méthode de rétroprojection filtrée, qui est basée sur un calcul dans le plan de Fourier.

1.4.1.2 Rétroprojection filtrée

La rétroprojection filtrée (FBP) permet d'éliminer des artefacts en filtrant les projections avant reconstruction. Ce filtrage faisant intervenir un produit de convolution dans l'espace direct est généralement calculé dans l'espace de Fourier.

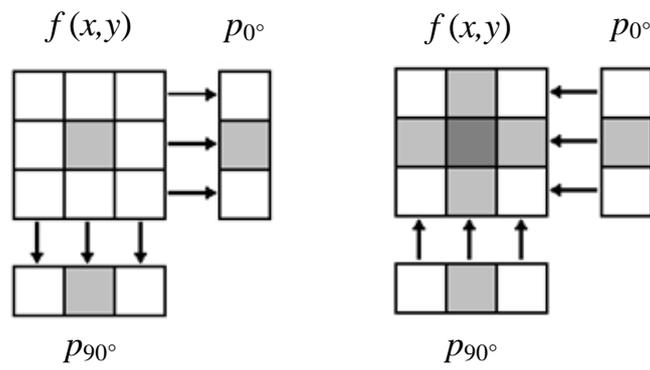
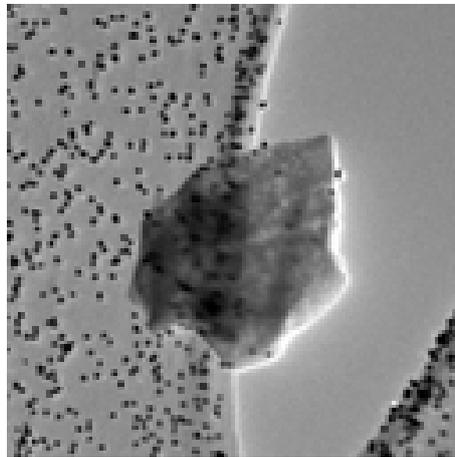
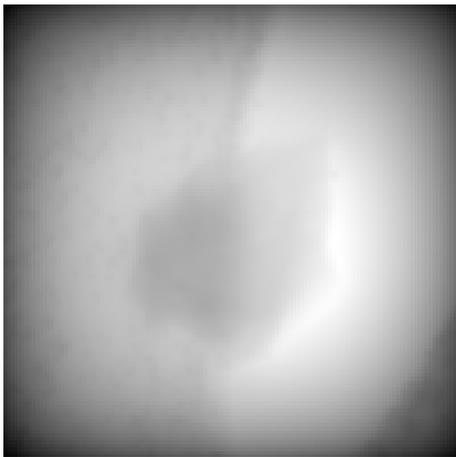


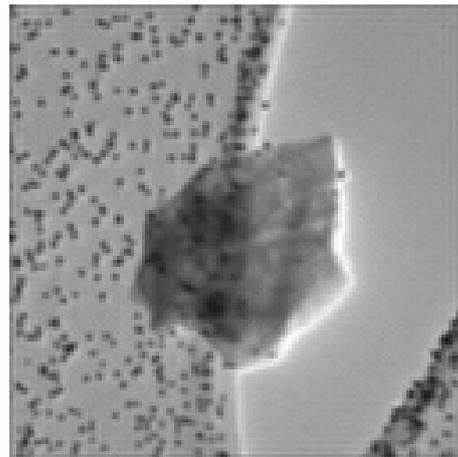
FIGURE 1.19 – Rétroprojection directe (à gauche : acquisition, à droite : reconstruction avec présence d’artefacts en étoile autour du pixel central).



(a)



(b)



(c)

FIGURE 1.20 – Reconstruction analytique : (a) l’image originale, (b-c) les images reconstruites à partir d’une série de projections simulée (intervalle angulaire $\theta \in [-90^\circ, 90^\circ]$ et pas de 1°) de l’image (a). (b) rétroprojection directe, (c) rétroprojection filtrée.

Le volume $f(x, y)$ peut être obtenu en inversant sa transformée de Fourier (Eq. 1.2) :

$$f(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(u, v) e^{2i\pi(ux+vy)} dudv \quad (1.13)$$

En échangeant le système de coordonnées dans le domaine de fréquence (u, v) , en un système de coordonnées polaires (w, θ) grâce aux substitutions suivantes :

$$\begin{aligned} u &= w \cos \theta \\ v &= w \sin \theta \\ dudv &= wdwd\theta \end{aligned}$$

nous pouvons écrire la transformée de Fourier inverse d'une fonction polaire :

$$f(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} F(w, \theta) e^{2i\pi w(x \cos \theta + y \sin \theta)} wdwd\theta \quad (1.14)$$

L'intégrale selon θ peut être scindée en deux de 0 à π , puis de π à 2π :

$$\begin{aligned} f(x, y) &= \int_0^{\pi} \int_0^{+\infty} F(w, \theta) e^{2i\pi w(x \cos \theta + y \sin \theta)} wdwd\theta \\ &+ \int_0^{\pi} \int_0^{+\infty} F(w, \theta + \pi) e^{2i\pi w(x \cos(\theta+\pi) + y \sin(\theta+\pi))} wdwd\theta \end{aligned} \quad (1.15)$$

en utilisant la propriété $f(w, \theta + \pi) = f(-w, \theta)$ l'expression ci-dessus pour $f(x, y)$ peut être écrite sous la forme

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} F(w, \theta) |w| e^{2i\pi wt} dw \right] d\theta \quad (1.16)$$

avec $t = x \cos \theta + y \sin \theta$.

Si nous substituons la transformée de Fourier de la projection à l'angle θ , $P_{\theta}(w)$, dans la transformée de Fourier bidimensionnelle $F(w, \theta)$, nous obtenons :

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} P_{\theta}(w) |w| e^{2i\pi wt} dw \right] d\theta \quad (1.17)$$

Soit

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} q_{\theta}(t) d\theta \quad (1.18)$$

avec

$$q_{\theta}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{\theta}(w) |w| e^{2i\pi wt} dw \quad (1.19)$$

Cette équation représente une opération de filtrage, où la réponse en fréquence est donnée par le filtre rampe $|w|$; c'est pourquoi $q_{\theta}(t)$ est appelé "projection filtrée". Les projections pour différents angles θ sont ensuite ajoutées pour former l'estimation de $f(x, y)$.

En pratique, le filtre rampe $h(w) = |w|$ va amplifier les hautes fréquences et donc le bruit dans les images reconstruites. C'est pourquoi une apodisation est nécessaire afin de réduire le poids des composantes de haute fréquence. La forme du filtre devient $h(w) = |w| \times A(w)$, où A est la fonction d'apodisation. De multiples filtres peuvent être utilisés : Hamming, Hann,... afin de filtrer le bruit tout en préservant au mieux les fréquences présentes dans l'objet, (cf. Fig. 1.21).

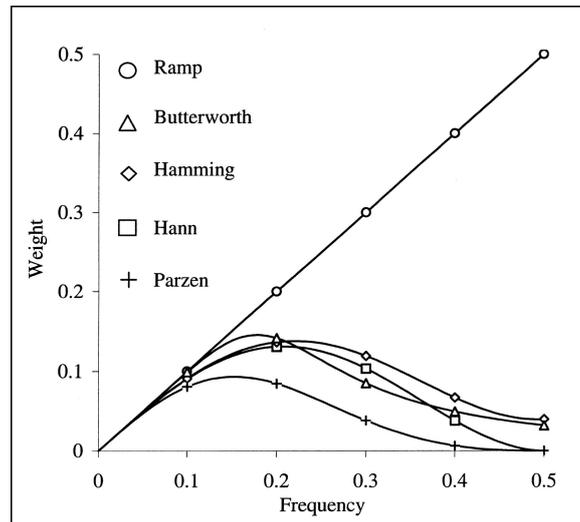


FIGURE 1.21 – Quelques filtres utilisés dans FBP et leur forme. Source : [Bruyant (2002)].

1.4.1.3 Méthode fondée sur le théorème de la coupe centrale

Rappelons que le théorème de la coupe centrale peut être formulé ainsi :

$$P_{\theta}(w) = F(u, v) = F(w \cos \theta, w \sin \theta)$$

Ce théorème indique que, si l'on dispose d'un nombre infini de projections d'un objet $P_{\theta}(w)$, alors $F(u, v)$ est connue en tout point du plan de fréquence (u, v) . La fonction de l'objet $f(x, y)$ est alors obtenue par la transformée de Fourier 2D inverse de $F(u, v)$. Dans notre cas d'étude (tomographie électronique), le nombre de projections étant limité, le remplissage du plan fréquentiel est très incomplet, surtout pour les hautes fréquences (cf. Fig. 1.15). Il persiste des vides qu'il faut remplir par interpolation.

Afin de répondre à ce problème d'interpolation, la transformée NFFT (*Non-Equispaced Fast Fourier Transform*) [Averbuch et al. (2006)], [Potts et Steidl (2000)] peut être utilisée. Les données de la grille polaire obtenues à partir des projections sont transposées dans une grille pseudo-polaire (linogramme) dont la configuration minimise les interpolations. Une transformée de Fourier inverse destinée à ce genre de grille est appliquée pour retrouver l'image. Cependant, la qualité de l'image reconstruite est pour l'instant encore inférieure à celle de la méthode FBP

classique. En effet, la reconstruction dans le domaine de Fourier avec une géométrie linogramme comporte une étape de fusion entre les données interpolées horizontalement et celles interpolées verticalement introduisant une perte de qualité.

1.4.1.4 Limitations expérimentales des méthodes analytiques

Les méthodes analytiques peuvent utiliser la transformée de Fourier rapide dans le calcul de la solution. Le temps d'exécution de la reconstruction tomographique peut donc être accéléré. C'est un avantage considérable par rapport aux méthodes itératives. En revanche, une reconstruction analytique ne sera efficace que si le nombre de projections est élevé et réparti de façon régulière sur 360° autour de l'objet (Ce n'est pas le cas de la tomographie électronique). En outre, les méthodes analytiques ne sont pas adaptées à l'introduction d'informations complémentaires sur l'objet à employer dans la reconstruction.

1.4.2 Approches algébriques de reconstruction

Alors que les méthodes analytiques reposent sur une solution mathématique exacte du problème de reconstruction, les techniques algébriques sont des méthodes itératives. En général, elles sont plus lourdes en temps de calcul. En revanche, ce type de méthodes a démontré une qualité supérieure de reconstruction. Ceci s'explique par la possibilité de prendre en compte, dans le processus de reconstruction, l'instrument avec ses défauts (modèle direct) et des informations a priori sur l'objet (régularisation). Dans cette partie, nous allons citer les méthodes les plus utilisées pour la reconstruction tomographique.

1.4.2.1 Modèle direct

En général, la problématique de la tomographie est représentée par la relation entre la projection mesurée (l'image observée) et l'objet à reconstruire, sous la forme suivante :

$$p_k = H_{\phi_k} \cdot f + e_k \quad (1.20)$$

où $p_k \in \mathbb{R}^M$ correspond aux projections (pour la $k^{\text{ième}}$ projection), $f \in \mathbb{R}^N$ sont les *voxels* décrivant l'objet, $H_{\phi_k} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ est une matrice de projection qui représente la contribution de chaque *voxel* de l'objet f à chaque projection p_k . Ainsi, chaque ligne de la matrice représente l'équation d'un rayon de projection ; $\phi_k \in \mathbb{R}^6$ sont les paramètres d'orientation et de position de l'objet par rapport à l'instrument (détecteur + source) pendant l'acquisition de la $k^{\text{ième}}$ projection. Le terme $e_k \in \mathbb{R}^M$ représente les erreurs dues au bruit de mesure et aux approximations du modèle.

Le principe de la tomographie est de résoudre le système linéaire précédent. À priori, l'inversion directe de la matrice permettrait de résoudre le problème de reconstruction une fois

pour toutes, pour une géométrie d'acquisition donnée. Cependant elle n'est pas réalisable en pratique, en raison de la très grande taille de la matrice à inverser. En plus, les données expérimentales étant inévitablement bruitées, ce système d'équations peut être inconsistant ou indéterminé, c'est-à-dire qu'il n'admet pas en général une solution unique.

Pour toutes ces raisons, à l'inversion de cette matrice est substituée une méthode itérative. Plusieurs méthodes sont employées pour résoudre le problème : ART (*Algebraic Reconstruction Technique*), SIRT (*Simultaneous Iterative Reconstruction Technique*), Reconstruction régularisée (Approche inverse avec régularisation),...

Modèle de distribution de l'intensité du pixel

Quand le problème de la tomographie s'exprime de manière discrète, comme dans l'équation 1.20, la transformée de Radon est remplacée par l'opérateur de projection H . Le calcul de cet opérateur fait appel à des considérations sur la distribution d'intensité des *pixels* (*voxels*). Supposons que l'objet à reconstruire soit décomposé sur une matrice objet (une grille 2D ou 3D). Nous devons choisir le modèle de distribution d'intensité dans les pixels de cette matrice. Le choix de cette distribution est primordial pour modéliser au mieux l'objet, et ainsi assurer la cohérence du projecteur avec le système de mesures réel.

Le modèle le plus simple consiste à considérer que toute l'intensité est concentrée en un point au centre du pixel. Ainsi, un pixel contribuerait au rayon de projection uniquement si ce dernier passe par ce point, (*cf.* Fig. 1.22-a). La distribution peut être modélisée par un disque concave (*cf.* Fig. 1.22-b), dont l'intensité n'est pas homogène mais plus faible au centre de telle sorte que, pour une géométrie parallèle, sa projection soit uniforme, indépendante de l'angle de projection. La distribution la plus utilisée est le modèle uniforme pour lequel on considère que l'intensité est uniformément distribuée dans tout le pixel (*cf.* Fig. 1.22-c). Elle est utilisée pour des modèles standards de projection tels que *ray driven* [Joseph (1982)] et *distance driven* [De Man et Basu (2004)]. D'autres modèles consistent à considérer une distribution "gaussienne" de l'intensité centrée au niveau du pixel (*cf.* Fig. 1.22-d). Cette distribution peut être modélisée par des B-splines de degré adéquat (souvent égal à 3) et débouche alors sur un projecteur appelé *B-splines driven* [Momey et al. (2011a)]. Dans certains cas, l'erreur de modélisation de *B-splines driven* est améliorée d'un facteur 10 par rapport au modèle *distance driven* [Momey et al. (2011b)].

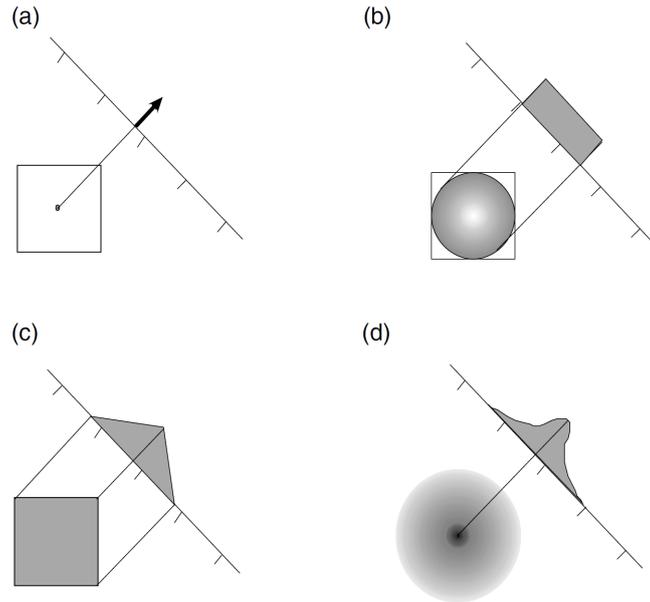


FIGURE 1.22 – Exemples de modèles de distribution d'intensité du pixel : (a) modèle de point, (b) modèle du disque concave, (c) modèle uniforme, (d) modèle gaussien. Source : [Wernick et Aarsvold (2004)].

Modélisation de l'opérateur de projection

Une fois le modèle de distribution d'intensité choisi, il est possible de déterminer les différents coefficients de la matrice H . Ces coefficients représentent la contribution géométrique de chaque pixel au rayon de projection.

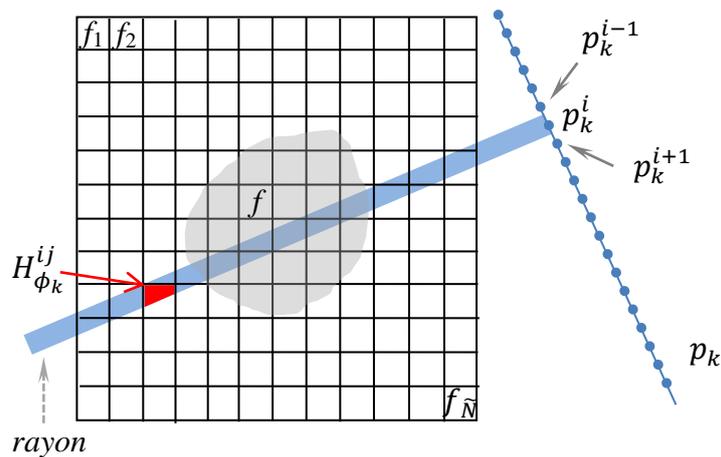


FIGURE 1.23 – Schéma d'une section du volume à reconstruire, représentée comme une matrice de \tilde{N} pixels dont les valeurs sont initialement inconnues. Les indices i , j et k représentent respectivement le pixel du détecteur, le voxel de l'objet et l'angle de projection.

Puisque H est discrète, les projections doivent être discrétisées également. Chaque projec-

tion, p_k , est discrétisée en Λ éléments. Elle est donc représentée par un vecteur dont chaque élément $p_k^i, i = 1, \dots, \Lambda$, possède une valeur connue⁴. La valeur de p_k^i est impactée par la somme des intensités pondérées de pixels traversés par le rayon (*cf.* Fig. 1.23).

Quel que soit le modèle (linéaire), la contribution de chaque *pixel* j sur un élément p_k^i , est notée $H_{\phi_k}^{ij}$. Si le modèle considère la distribution d'intensité comme uniforme sur le pixel alors cette contribution est proportionnelle à la surface d'intersection entre la largeur du rayon et le pixel.

La matrice H est une matrice creuse ce qui permet d'optimiser l'espace mémoire utilisé et également d'améliorer le temps de calcul de cette matrice. Dans les algorithmes de reconstruction, nous stockons seulement les coefficients non nuls accompagnés des indices ligne et colonne correspondant à leur position dans la matrice.

1.4.2.2 ART

Cet algorithme, très connu en tomographie, est un cas particulier d'algorithme de projections sur des ensembles convexes, pour la résolution d'un système d'équations linéaires [Kaczmarz (1937)]. Le principe général de l'algorithme ART [Gordon *et al.* (1970)], est de partir d'une image initiale $f^{(0)}$ (souvent égale à zéro) et de corriger celle-ci pas à pas en utilisant une seule ligne de projection à la fois. Il compare l'écart entre les lignes de projections simulées à partir de $f^{(\tau)}$, égal à $\sum_{l=1}^N H_{\phi_k}^{il} f_l^{(\tau)}$ et les lignes de projections mesurées p_k^i . L'algorithme ART peut se traduire par l'expression :

$$f_j^{(\tau+1)} = f_j^{(\tau)} + \lambda \frac{p_k^i - \sum_l H_{\phi_k}^{il} f_l^{(\tau)}}{\|H_{\phi_k}^{ij}\|^2} H_{\phi_k}^{ij} \quad (1.21)$$

où $f_j^{(\tau)}$ est la valeur du *pixel* d'indice j à l'itération τ , $\lambda < 1$ est un facteur de relaxation permettant l'accélération de la convergence, $\|H_{\phi_k}^{ij}\|^2$ est un terme de normalisation, égal au nombre de pixels traversés par le rayon i lorsque le modèle est le modèle ponctuel (*cf.* Fig. 1.22-a).

En pratique, la solution obtenue par cette méthode souffre fortement du phénomène d'amplification du bruit.

1.4.2.3 SIRT

Les méthodes de type SIRT [Gilbert (1972)], procèdent pixel par pixel. Elles consistent à corriger un pixel f_j en utilisant simultanément tous les rayons qui le traversent. Soit $f_j^{(\tau)}$ la

4. Cette valeur correspond à la mesure obtenue expérimentalement pour chaque rayon de projection. Au total, on obtient $M \times \Lambda = T$ éléments de projection, avec Λ le nombre de rayons par angle de vue, et M le nombre total d'angles de vue.

valeur du pixel f_j à l'itération τ , les méthodes SIRT peuvent s'exprimer sous la forme suivante :

$$f_j^{(\tau+1)} = f_j^{(\tau)} + \frac{\sum_i \left[H_{\phi_k}^{ij} \left(p_k^i - \sum_l H_{\phi_k}^{il} f_l^{(\tau)} \right) / \sum_l H_{\phi_k}^{il} \right]}{\sum_i H_{\phi_k}^{ij}} \quad (1.22)$$

Ces méthodes sont un cas particulier d'une minimisation de type gradient [Idier (2001)], [Sorzano *et al.* (2006)], [Gregor et Benson (2008)], où la fonction à minimiser est de la forme : $\|p - Hf\|^2$. Le minimum de cette fonction peut être trouvé par un algorithme SIRT grâce aux itérations suivantes :

$$f^{(\tau+1)} = f^{(\tau)} + \lambda^{(\tau)} D H^T (p - Hf^{(\tau)}) \quad (1.23)$$

avec $D = \text{Diag} \{1/\sum_i H^{ij}\}$, et $\lambda^{(\tau)} < 1$ le coefficient de relaxation permettant l'accélération de la convergence.

La version simplifiée de cet algorithme considère H^T comme un opérateur de rétro-projection. Ainsi, le coût de calcul de cet algorithme à chaque itération est principalement une projection Hf et une rétro-projection $H^T (p - Hf^{(\tau)})$.

Avec cette approche, la convergence est plus lente qu'avec la méthode ART mais les images reconstruites sont de qualité supérieure [Herman (2009)].

1.4.2.4 DART

La méthode DART (*Discrete Algebraic Reconstruction Technique*) [Batenburg et Sijbers (2007b)], [Batenburg *et al.* (2009)], est un algorithme itératif qui combine une méthode de reconstruction algébrique, telle que ART, ou SIRT,... avec des étapes de discrétisation par segmentation (*cf.* Fig. 1.24). Elle s'applique au domaine de la tomographie discrète où l'on cherche à reconstruire des objets comportant peu de phases différentes. Une contrainte est que la reconstruction d'un tel objet ne doit contenir qu'un seul niveau de gris pour chaque type de phase.

Cette méthode peut répondre aux problèmes où l'on dispose d'un faible nombre de projections et/ou de zone aveugle. Afin d'appliquer la méthode DART, il faut connaître assez précisément le nombre et la valeur de l'intensité en niveaux de gris des phases de l'objet à reconstruire, ce qui est un des inconvénients majeurs de cette méthode. En outre, bien que l'on connaisse ces informations, l'étape de segmentation est également délicate.

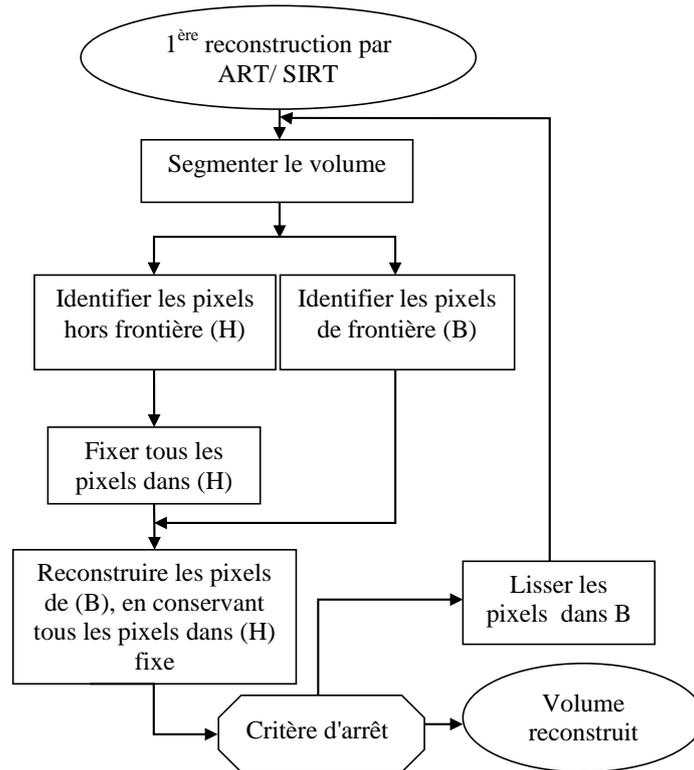


FIGURE 1.24 – Principe de la méthode DART.

Précisément, nous prenons un exemple tiré de l'article [Batenburg *et al.* (2009)]. Dans cet exemple les auteurs veulent reconstruire deux nanoparticules qui ont seulement une composition, intégrées dans un support homogène. La figure 1.25-a représente une coupe de cet échantillon, orthogonale à l'axe de tilt. 13 projections de cet échantillon sont mesurées pour des angles d'inclinaison variant de -60 à 60 degrés par pas de 10 degrés.

La méthode DART est initialisée à partir d'une première reconstruction par l'algorithme SIRT, le tomogramme obtenu est représenté dans la Figure.1.25-b. La reconstruction est ensuite segmentée (*cf.* Fig.1.25-c) ; ainsi la reconstruction segmentée indique deux catégories de pixels :

- Les pixels de frontière (B) : pixels proches ou appartenant aux frontières des objets (*cf.* Fig.1.25-d : les pixels noirs).
- Les pixels hors frontière (H) : pixels complémentaires aux pixels de frontière (*cf.* Fig.1.25-d : les pixels blancs).

Ensuite, l'algorithme SIRT est utilisé à nouveau pour reconstruire le volume avec seulement les niveaux de gris des pixels dans (B) autorisés à varier. Les niveaux de gris des pixels (H) sont maintenus fixes (*cf.* Fig.1.25-e). Après cette étape, la frontière peut être très accidentée, car tous les pixels sont autorisés à varier indépendamment. Une étape de lissage est exécutée sur la frontière pour réduire partiellement cette rugosité (*cf.* Fig.1.25-f). Le processus consiste à répéter les étapes précédentes, à partir de la reconstruction lissée. Il s'arrête lorsqu'il n'y a

plus de variation significative de la frontière.

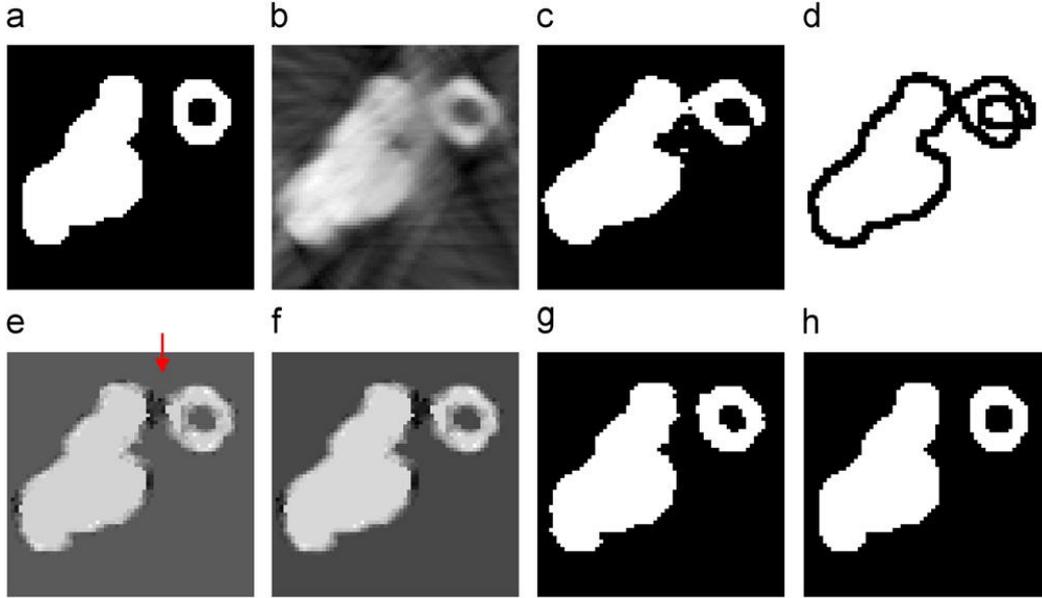


FIGURE 1.25 – Reconstruction par DART : (a) Image originale, (b) Image reconstruite par SIRT, (c) Image segmentée de (b), (d-g) Les étapes de DART, (h) Image reconstruite finale (Source : [Batenburg *et al.* (2009)]).

1.4.2.5 Reconstruction régularisée

Généralement, le problème de reconstruction tomographique peut être considéré comme un problème inverse, qui nous amène à chercher une bonne estimation des paramètres de l'objet f^+ "satisfaisant presque" l'équation 1.20. C'est un problème inverse mal posé car l'opérateur $H_{\phi_k}^{-1}$ n'existe pas, ou n'est pas continu. En outre, le mauvais conditionnement de H_{ϕ_k} entraîne l'amplification du bruit si l'on applique sa (pseudo-)inverse aux données. La reconstruction est obtenue en minimisant le critère du type moindres carrés régularisés $J(f)$ suivant :

$$\begin{aligned}
 f^+ &= \arg \min_f J(f) = \arg \min_f J_{\text{data}}(f) + \lambda J_{\text{prior}}(f) \\
 &= \arg \min_f \sum_{k=1}^M \|p_k - H_{\phi_k} \cdot f\|_{W_k}^2 + \lambda J_{\text{prior}}(f)
 \end{aligned}
 \tag{1.24}$$

où $J_{\text{data}}(f)$ est un terme de fidélité aux données, $J_{\text{prior}}(f)$ est un terme de régularisation qui renforce les informations *a priori* sur l'image cherchée, et $\lambda > 0$ un coefficient de régularisation permettant d'ajuster le compromis entre le terme de fidélité aux données et le degré de régularité. La matrice de poids W_k , typiquement, est l'inverse de la matrice de covariance du bruit $W_k = \text{Cov}(e_k)^{-1}$ [Tarantola (1987)].

Méthode d'optimisation

L'algorithme de reconstruction, représenté par l'équation 1.24, revient à résoudre un problème d'optimisation convexe. Pour cela, nous avons utilisé un algorithme itératif de type quasi-Newton à mémoire limitée dit L_BFGS⁵. Une description détaillée de ces algorithmes peut être trouvée dans le livre de Nocedal et Wright [Nocedal et Wright (2006)].

Méthode de Newton

La méthode de Newton consiste à améliorer les paramètres f_k courants sur la base du développement de Taylor à l'ordre 2 de la fonction de coût J :

$$J(f_k + s) - J(f_k) \approx s^\top \cdot \nabla J(f_k) + \frac{1}{2} s^\top \cdot \nabla^2 J(f_k) \cdot s \stackrel{\text{def}}{=} m_k(s) \quad (1.25)$$

où $\nabla J(f_k)$ est le gradient du critère J en f_k , $\nabla^2 J(f_k)$ est la matrice Hessienne du critère J en f_k et $m_k(s)$ est l'approximation quadratique du critère J au voisinage de f_k .

Pour un critère strictement convexe J , la matrice Hessienne est toujours positive définie et le pas s_k qui minimise $m_k(s)$ est donné par :

$$s_k = - (\nabla^2 J(f_k))^{-1} \nabla J(f_k). \quad (1.26)$$

Il suffit ensuite de mettre à jour les paramètres : $f_{k+1} = f_k + s_k$.

Bien que la méthode de Newton soit très efficace en termes de vitesse de convergence, elle a un inconvénient majeur : elle nécessite le calcul de la matrice Hessienne $\nabla^2 J(f_k)$. Typiquement dans un problème de très grande dimension comme celui de la tomographie, le calcul du pas de Newton s_k est, aujourd'hui, numériquement impossible (sauf dans des cas très particuliers) à cause de la taille de la matrice Hessienne.

Méthode quasi-Newton

La méthode quasi-Newton est dérivée de la méthode Newton et consiste à mettre les paramètres à jour par :

$$f_{k+1} = f_k + \alpha_k d_k,$$

où la direction de descente d_k et le pas α_k sont déterminés à chaque itération k . Pour construire la direction de recherche, une approximation de la matrice Hessienne (ou de son inverse) est mise en œuvre. Le pas est déterminé par des conditions (par exemple conditions de Wolfe) qui visent à garantir la convergence globale de l'algorithme.

Le premier algorithme de quasi-Newton, exploite une approximation de l'inverse de la Hessienne proposée par Davidon en 1959 [Davidon (1991)] et exige seulement le calcul du gradient

5. La méthode L-BFGS tire son nom des initiales des mathématiciens C. G. Broyden, R. Fletcher, D. Goldfarb et D. F. Shanno, qui l'ont découvert indépendamment en 1960, le "L" étant pour distinguer la variante à mémoire limitée.

de la fonction de coût à chaque itération. D'autres variantes de type quasi-Newton ont été proposées, parmi celles-ci on peut citer l'algorithme BFGS qui est le plus utilisé car, en pratique, souvent le plus efficace. La procédure standard de la méthode BFGS peut être décrite ainsi :

Soit une solution de départ f_0 , une tolérance de convergence $\epsilon > 0$, et une approximation de l'inverse de la Hessienne, \mathcal{H}_0 , qui peut-être la matrice identité, I .

En partant de $k \leftarrow 0$ et **tant que** $\|\nabla J(f_k)\| > \epsilon$:

Calculer une direction de descente : $d_k = -\mathcal{H}_k \cdot \nabla J(f_k)$.

Trouver le pas α_k qui satisfait les conditions de *Wolfe* :

$$\begin{aligned} J(f_k + \alpha_k d_k) &\leq J(f_k) + c_1 \alpha_k \nabla J(f_k)^\top \cdot d_k \\ \nabla J(f_k + \alpha_k d_k)^\top \cdot d_k &\geq c_2 \nabla J(f_k)^\top \cdot d_k \end{aligned}$$

avec $0 < c_1 < c_2 < 1$.

Mettre à jour les paramètres : $f_{k+1} = f_k + \alpha_k d_k$.

Mettre à jour l'approximation de l'inverse de la matrice Hessienne :

$$\mathcal{H}_{k+1} = (I - \rho_k s_k \cdot y_k^\top) \cdot \mathcal{H}_k \cdot (I - \rho_k y_k \cdot s_k^\top) + \rho_k s_k \cdot s_k^\top$$

avec :

$$\begin{cases} \rho_k = \frac{1}{y_k^\top \cdot s_k} \\ s_k = f_{k+1} - f_k \\ y_k = \nabla J(f_{k+1}) - \nabla J(f_k) \end{cases}$$

Incrémenter le numéro d'itération : $k \leftarrow k + 1$.

Fin (Tant que).

Les matrices d'approximation de Hessiennes générées par les approches quasi-Newton sont habituellement denses, même dans le cas où la vraie Hessienne est creuse. Le coût du stockage de ces approximations est donc excessif pour les problèmes de grandes dimensions. Des variantes (méthodes de quasi-Newton à mémoire limitée) existent pour résoudre ce problème. Par exemple, l'algorithme VMLM (*Variable Metric Limited Memory*) [Nocedal (1980)], ou L-BFGS [Liu et Nocedal (1989)], [Gilbert et Lemaréchal (1989)] qui ont besoin de stocker seulement quelques paires de vecteurs s_k et y_k pour calculer l'approximation Hessienne sans la stocker directement.

Régularisation

Lorsque l'on réalise l'acquisition des projections, une perte d'information se produit. Afin de compenser cette perte, la régularisation $J_{\text{prior}}(f)$ permet de prendre en compte des informations supplémentaires dites *a priori*, représentant les propriétés physiques ou morphologiques de l'objet, qui peuvent être connues à l'origine. La reconstruction devient alors un compromis entre un bon accord aux données et une solution plausible compte tenu de ce que l'on connaît a priori de l'objet à reconstruire. L'information *a priori* peut prendre diverses formes. Elle peut

par exemple imposer la positivité de la solution, qui est souvent la réalité physique de l'objet. D'autre part, en favorisant des solutions globalement lisses, l'information *a priori* aide à pallier le phénomène d'amplification des hautes fréquences dans l'image reconstruite, imputables au bruit et aussi à corriger les artefacts causés par des projections manquantes, etc...

La régularisation classique est celle de Tikhonov [Tikhonov (1963)] qui revient à pénaliser la norme quadratique de l'image avec $J_{\text{prior}}(f) = \|f\|^2$. La reconstruction obtenue est généralement trop uniforme par rapport à l'image originale car un grand λ est obligatoire afin de réduire efficacement le bruit. D'où résulte une difficulté à discriminer les petites structures rapprochées.

Afin d'analyser des matériaux, l'objet à reconstruire en tomographie électronique est composé par un nombre connu de phases (2 ou 3). Ces phases forment des zones relativement continues par morceaux. Or les informations de contours sont essentiellement contenues dans les dérivées de l'image f . D'où l'idée de favoriser une image continue par morceaux. C'est le principe d'un type de régularisation, appelé *variation totale* (TV) [Rudin *et al.* (1992)], [Mirone *et al.* (2013)] qui a prouvé son efficacité à supprimer des artefacts tout en préservant les discontinuités dans l'image. L'expression de $\text{TV}(f)$ (sous sa forme théorique), généralisée à 2 dimensions, s'écrit sous la forme :

$$\text{TV}(f) = \int_{\Omega \in \mathbb{R}^2} \|\nabla f\|_2 \, dx \, dy = \int_{\Omega \in \mathbb{R}^2} \sqrt{(\nabla_x f)^2 + (\nabla_y f)^2} \, dx \, dy \quad (1.27)$$

La TV est non seulement connue dans le domaine du débruitage [Rudin *et al.* (1992)], [Chambolle (2004)], mais elle est aussi très utilisée dans la tomographie médicale [Sidky *et al.* (2006)], [Ritschl *et al.* (2011)] pour résoudre le problème de réduction du nombre de projections. Dans le domaine de la tomographie électronique, l'efficacité de ce critère a commencé à attirer l'attention des chercheurs [Goris *et al.* (2012)].

1.4.3 Reconstruction avec méthode de l'état de l'art

Nous illustrons dans ce paragraphe quelques reconstructions effectuées avec les algorithmes de l'état de l'art présentés. Nous prenons comme volume de simulation (fantôme) un objet binaire ressemblant à une nanoparticule support de catalyseur. Ce volume a été obtenu à partir d'une nanoparticule reconstruite par segmentation en 2 phases. La figure 1.26a représente une section transversale de l'échantillon, orthogonale à l'axe d'inclinaison. La série contient 142 projections simulées (256×256 pixels), calculées de -71° à $+70^\circ$ par pas angulaires de $+1^\circ$. Les figures 1.26b, 1.26c, 1.26d représentent la coupe correspondante dans le volume reconstruit avec FBP, SIRT et Reconstruction régularisée combinée avec la régularisation du type TV. Ces figures montrent que la méthode de reconstruction régularisée donne la meilleure reconstruction, présentant le moins d'artefacts (notamment sur les bords de l'objet reconstruit) causés par les projections manquantes. Cette méthode est donc un bon compromis pour résoudre le problème des données incomplètes.

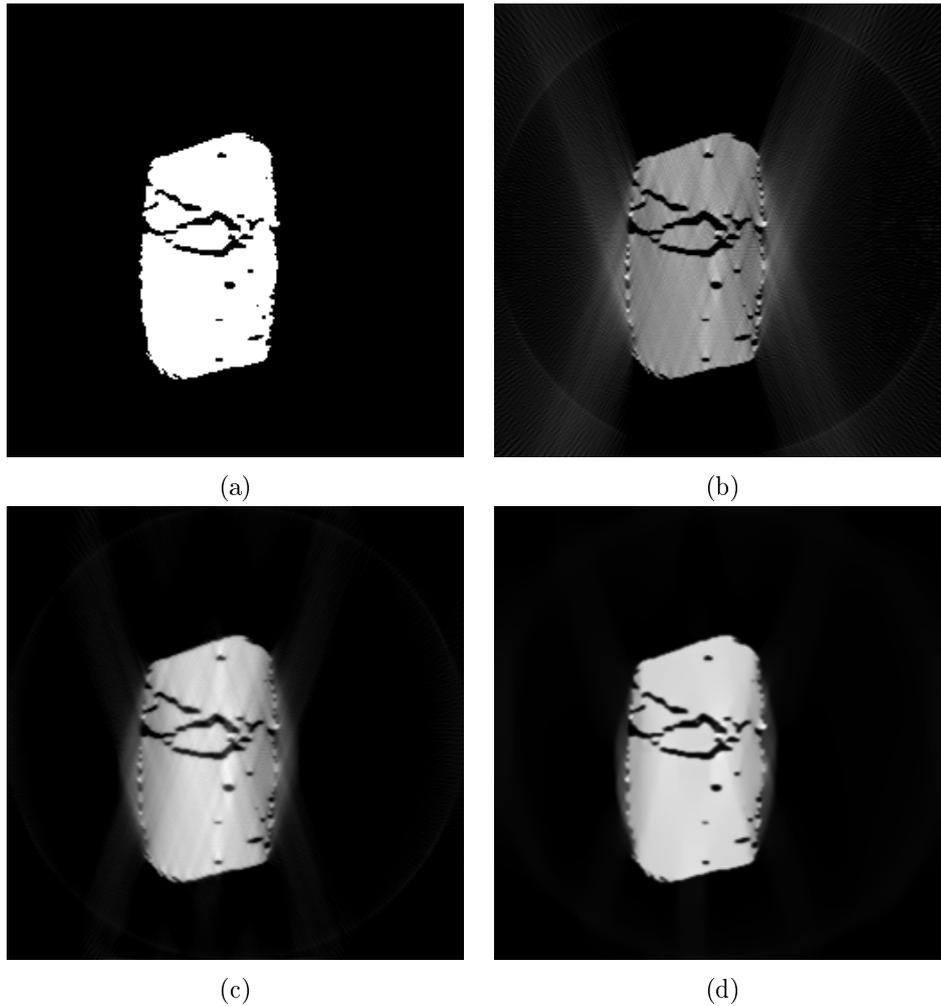


FIGURE 1.26 – Reconstruction avec méthode de l'état de l'art. Section transversale du fantôme d'origine (a). Coupe correspondante dans le volume reconstruit avec : FBP (b) , SIRT (c) et approche inverse avec régularisation de type TV (d).

1.4.4 Spécificité de la tomographie électronique

Comme nous l'avons évoqué dans la section 1.3, il y a deux problèmes majeurs en tomographie électronique : le décalage des projections et le nombre limité de ces projections. Généralement, le problème de décalage des projections est corrigé avant d'effectuer la reconstruction ; nous verrons plus loin dans ce mémoire les méthodes les plus souvent utilisées (*cf.* Section 2.1).

Un autre axe de recherche toujours focalisé sur le problème d'alignement, ne considère pas l'alignement comme une étape préalable. Les méthodes les plus récentes considèrent le problème de tomographie électronique comme un problème d'optimisation conjointe. La reconstruction de l'objet et le positionnement des projections sont optimisés simultanément en minimisant une fonction de coût par rapport aux *voxels* f et à $\vartheta = \{\phi_k\}_{k=1}^M$, l'ensemble des paramètres

de positionnement (pour les M projections) [Yang *et al.* (2005)] :

$$\{f, \vartheta\}^* = \arg \min_{f, \vartheta} J(f, \vartheta) \quad (1.28)$$

Pour des mesures statistiquement indépendantes, la fonction de coût s'écrit :

$$J(f, \vartheta) = \sum_{k=1}^M J_k(f, \phi_k) + J_{\text{prior}}(f) + \sum_{k=1}^M c_k(\phi_k) \quad (1.29)$$

avec J_k - terme de vraisemblance pour la projection k , soit par exemple pour un bruit gaussien :

$$J_k(f, \phi) = (p_k - H_\phi \cdot f)^\top \cdot W_k \cdot (p_k - H_\phi \cdot f) \quad (1.30)$$

où la matrice de poids est l'inverse de la matrice de covariance du bruit : $W_k = \text{Cov}(e_k)^{-1}$. La fonction $J_{\text{prior}}(f)$ renforce les *a priori* sur les voxels f et les fonctions $c_k(\phi_k)$ introduisent des connaissances (mesurées ou *a priori*) sur les paramètres d'orientation.

L'objectif de ce travail de thèse est la reconstruction tomographique électronique d'un objet à partir de ses projections décalées et limitées en couverture angulaire. Mathématiquement, cette reconstruction est équivalente à résoudre le problème (1.28), qui est difficile à résoudre directement car il y a beaucoup de paramètres et ceux-ci sont hétérogènes (voxels, translations et angles). De plus, à cause du critère d'alignement, la fonction de coût admet plusieurs optima locaux ce qui complique son optimisation. Enfin la couverture angulaire des projections est limitée.

Face aux défis que nous avons évoqués ci-dessus, nous avons cherché des moyens de fournir une résolution approchée et efficace du problème (1.28). Ceci par un découpage de ce problème difficile en sous-problèmes plus simples à résoudre et pour lesquels nous avons des méthodes de résolution efficaces.

1.4.4.1 Stratégie de recherche hiérarchique

À paramètres de positionnement ϑ donnés, trouver les meilleurs coefficients de *voxels* est l'analogie d'une reconstruction dont la solution, qui dépend formellement de ϑ , est :

$$f^+(\vartheta) = \arg \min_f J(f, \vartheta) \quad (1.31)$$

En injectant cette solution dans la fonction de coût, l'équation 1.28, on obtient un critère ne dépendant que de ϑ :

$$J^+(\vartheta) = J(f^+(\vartheta), \vartheta) \quad (1.32)$$

Les meilleurs paramètres de positionnement sont alors obtenus en résolvant un problème d'optimisation de taille plus réduite :

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta} J^+(\vartheta) \quad (1.33)$$

La solution du problème global est alors donnée par :

$$\{f, \vartheta\}^* = \{f^+(\vartheta^*), \vartheta^*\} \quad (1.34)$$

La reconstruction, l'équation 1.31, peut être réalisée par un algorithme habituel comme FBP, ART, SIRT ou encore mieux par une reconstruction régularisée combinée avec la régularisation du type TV. Le problème global du recalage est multimodal mais continu ; on s'attend donc à ce que les *puits* autour des minima locaux soient de tailles finies non-négligeables. Pour une initialisation suffisamment proche de la solution, la meilleure solution sera alors obtenue par une simple optimisation continue locale. L'initialisation est donc une étape préalable cruciale qui revient à pré-aligner les projections.

La méthode d'optimisation hiérarchique est trop coûteuse en temps de calcul pour être appliquée telle qu'elle. Pour accélérer le processus, nous proposons une autre approche consistant en une dégradation de la méthode hiérarchique de type *optimisation alternée*, qui est composée de deux étapes. La première étape consiste en un processus de pré-alignement, qui vise à réduire les forts déplacements résultant de l'acquisition entre les projections successives. Dans la seconde étape, les projections pré-recalées sont employées pour initialiser un processus itératif et alterné d'alignement et reconstruction, minimisant alternativement une fonction de coût basée sur (i) la reconstruction du volume et une fonction basée sur (ii) l'alignement d'une projection réelle avec sa version simulée obtenue à partir du volume reconstruit de (i). À la fin de ce processus, nous obtenons une reconstruction correcte du volume, les projections étant correctement alignées.

Le pré-alignement est toujours un ingrédient crucial pour la méthode d'optimisation alternée, qui raffine la qualité de l'alignement final et donc de ce fait la qualité de la reconstruction. Dans la section qui suit, nous allons présenter notre méthode permettant d'effectuer efficacement cette étape (*cf.* Section 2.2), sans oublier de préciser la méthode d'optimisation alternée (*cf.* Section 2.3).

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le principe de la tomographie puis celui de la tomographie électronique. Cette dernière est très intéressante dans l'analyse et la caractérisation des matériaux où elle permet d'obtenir des informations 3D d'un objet (à l'échelle de quelques

nanomètres) à partir des projections acquises par un microscope électronique en transmission (MET). Nous en avons mentionné les principaux défauts (décalages des projections et projections manquantes) qui dégradent la résolution finale de l'objet reconstruit. Les méthodes de reconstruction tomographique conventionnelles (présentées dans les sections 1.4.1 et 1.4.2) ne permettent pas de corriger ces défauts. Pour pallier ce problème, nous avons reformulé le problème de la nanotomographie comme un problème inverse. Cela nous permet à la fois d'aligner les projections et d'effectuer la reconstruction. Nous proposons de résoudre ce problème inverse par la méthode d'*optimisation alternée*, qui est donc le sujet du chapitre 2.

Chapitre 2

Méthode de reconstruction par optimisation alternée

2.1 État de l'art du recalage

L'alignement précis des projections est une étape cruciale pour réaliser une reconstruction tomographique ; elle consiste à ramener toutes les projections dans un système de coordonnées tridimensionnelles commun. Un mauvais alignement des images entraînera des artefacts dans la reconstruction. Dans cette section, nous présenterons les trois grands types de techniques utilisées habituellement en tomographie électronique : l'alignement par suivi de points de repère, l'alignement sans marqueurs, et l'alignement intégré au processus de reconstruction.

2.1.1 Alignement par suivi de points de repère

Les techniques d'alignement les plus répandues emploient en général un suivi par nanoparticules d'or¹(*cf.* Fig. 2.1), injectées dans l'échantillon observé. En principe, cette technique se réalise en deux étapes : tout d'abord, les images sont pré-alignées par corrélation croisée. Ce pré-alignement permet de simplifier la mise en correspondance des marqueurs dans ces images, car deux images d'angles de tilt consécutifs sont très semblables. Les marqueurs de ces deux images vont donc quasiment se superposer. Ensuite, les marqueurs sont détectés et mis en correspondance à travers la série d'images, puis un modèle géométrique 3D des marqueurs est estimé par optimisation. Ce modèle permet d'aligner les images avec une grande précision.

L'alignement par suivi de points de repère a deux avantages. Premièrement, comme les paramètres de transformation des images de la série de projections sont calculés par une optimisation globale, la cohérence globale en ce qui concerne l'alignement des images est garantie. Deuxièmement, la méthode peut être appliquée pour corriger les changements anisotropes et non-uniformes du spécimen pendant la série d'inclinaisons.

1. On parle de marqueurs, en anglais "Fiducial markers".

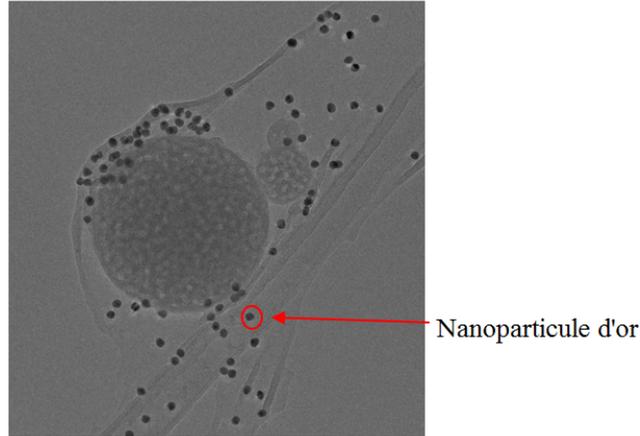


FIGURE 2.1 – Une projection avec des marqueurs.

Bien que cette méthode soit robuste, elle présente cependant des inconvénients pratiques. D’abord, il peut être difficile d’obtenir une répartition très homogène des marqueurs sur l’échantillon, condition nécessaire pour permettre un bon alignement. Ensuite, pour des reconstructions à résolution élevée (volume reconstruit avec des voxels $\leq 1nm^3$), la taille des nanoparticules d’or, de diamètre moyen $5nm$, engendre un masquage d’une partie non négligeable de l’objet à reconstruire. De plus, ces nanoparticules d’or étant généralement l’élément le plus dense présent dans l’échantillon, elles introduisent des artefacts spécifiques de rétroprojection dans l’objet reconstruit. Mentionnons encore un inconvénient supplémentaire : la difficulté à suivre les positions exactes des marqueurs, ce qui peut générer des temps de calculs supplémentaires considérables. Plusieurs méthodes de suivi automatique des marqueurs ont été développées afin de surmonter ce dernier obstacle [Ress *et al.* (1999)], [Brandt *et al.* (2001b)], [Castaño-Díez *et al.* (2007)], [Amat *et al.* (2008)]. Enfin, selon la complexité de l’alignement, l’utilisation des marqueurs exige une certaine compétence dans le choix des paramètres de la méthode de régression et dans l’interprétation des résultats.

Certaines approches [Brandt *et al.* (2001a)], [Brandt et Ziese (2006)], [Sorzano *et al.* (2009)], sont basées sur des points d’intérêt extraits automatiquement, puis un suivi de ces points dans la série d’images pour trouver les paramètres d’alignement. Elles mettent en place une pré-étape de détection de zones texturées dans les projections servant de marqueurs. Ces techniques, très utilisées dans les applications biologiques, le sont beaucoup moins dans les applications matériaux, les projections étant moins texturées.

2.1.2 Alignement de proche en proche sans marqueurs

Dans le cas où l’utilisation des marqueurs n’est pas évidente, les méthodes de recalage de proche en proche sont souvent une bonne solution pour effectuer l’alignement. Le principe de ces techniques est basé sur l’alignement entre deux images. Plus précisément, la première

image d'une série de projections est choisie comme image de référence, puis chaque image est alignée avec l'image précédente de la série. Ainsi, les déplacements des images peuvent être séquentiellement compensés dans la série entière.

2.1.2.1 Correction de translation

Généralement, pour aligner deux projections, les méthodes de recalage sans marqueurs utilisent la corrélation croisée [Frank et McEwen (1992)] corrigeant bien le décalage en translation. En voici une définition :

Soit deux images I_1 et I_2 , l'image de corrélation croisée normalisée \mathcal{C} est :

$$\mathcal{C}(k, l) = \frac{\sum_i \sum_j I_1(i, j) I_2(i - k, j - l)}{\sqrt{\sum_{i,j} I_1(i, j)^2} \sqrt{\sum_{i,j} I_2(i - k, j - l)^2}} \quad (2.1)$$

où les sommes sont prises sur la zone de recouvrement des images décalées. Le 2^{ième} membre fait apparaître une translation de l'image I_2 sur l'image I_1 (numérateur), le dénominateur permettant de normaliser l'image \mathcal{C} entre 0 et 1. Le point (k, l) présente un maximum lorsque les images I_1 et I_2 sont alignées. Il suffit de détecter le maximum de corrélation de l'image \mathcal{C} pour obtenir le vecteur de déplacement à appliquer à I_2 (*cf.* Fig. 2.2). Cette figure peut être considérée comme une carte de corrélation, qui contient plusieurs maxima locaux. Chaque maxima donne une solution de décalage possible. C'est pourquoi le problème d'alignement est un problème multimodal.

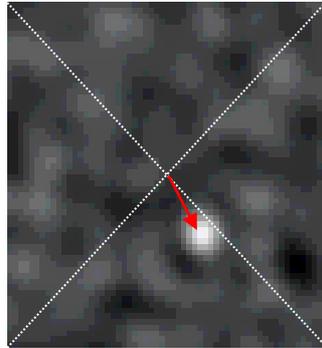


FIGURE 2.2 – Image de corrélation croisée normalisée \mathcal{C} , contenant plusieurs maxima locaux ; les coordonnées de la valeur maximale de \mathcal{C} donnent le vecteur de déplacement.

Pour accélérer le calcul, notamment pour des images de grande taille, il est possible de calculer la corrélation normalisée dans le domaine de Fourier, l'image de corrélation se ramène pour l'essentiel à une simple multiplication [Reddy et Chatterji (1996)] :

$$\mathcal{C} = \text{TF}^{-1} \left[\frac{\text{TF}[I_1] \cdot \text{TF}[I_2]^*}{|\text{TF}[I_1] \cdot \text{TF}[I_2]^*|} \right] \quad (2.2)$$

où TF désigne la transformée de Fourier, * est l'opérateur de conjugaison complexe.

Le calcul de \mathcal{C} peut être rendu plus robuste en utilisant une technique basée sur les gradients de l'image représentés sous une forme complexe (méthode "RobustFFT") [Tzimiropoulos *et al.* (2010)].

$$\mathcal{C} = \text{Re} \{ \text{TF}^{-1} [\text{TF} [G_1(u)] \cdot \text{TF} [G_2(u)]^*] \} \quad (2.3)$$

où $G_i(u) = G_{i,x}(u) + jG_{i,y}(u)$ est une image gradient complexe, $j = \sqrt{-1}$; et :

$G_{i,x}(u) = \nabla_x I_i$ est le gradient en x de l'image i

$G_{i,y}(u) = \nabla_y I_i$ est le gradient en y de l'image i

Cette approche combine les avantages des méthodes basées sur les gradients (nécessitant moins d'informations de texture, ce qui est le cas des projections MET) avec la robustesse et la rapidité des routines de transformée de Fourier rapide (FFT) pour le calcul de corrélation.

2.1.2.2 Correction de rotation et mise à l'échelle

Supposons deux images bien corrigées des décalages en translation. Les décalages de rotation et de facteur d'échelle peuvent être estimés en utilisant la propriété d'invariance de la représentation d'une image en coordonnées log-polaire [Zokai et Wolberg (2005)], [Matungka *et al.* (2009)] par rotation et changement d'échelle. Selon cette propriété, une rotation de même centre que celui de la transformée a pour effet un simple décalage de la transformée le long de l'axe des angles γ . De même, un changement d'échelle a pour effet un simple décalage de la transformée le long de l'axe des rayons ρ . Le changement de repère effectué est schématisé dans la figure 2.3.

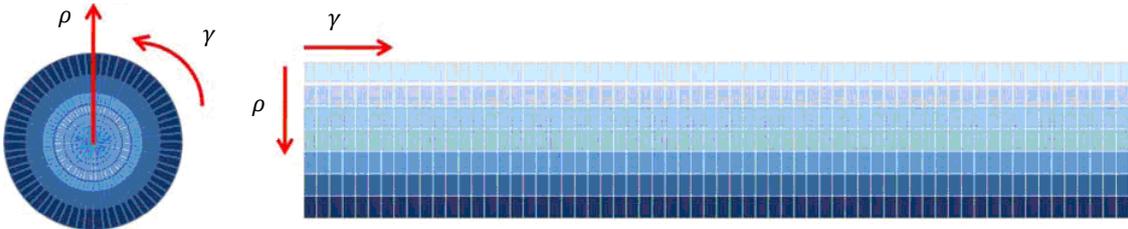


FIGURE 2.3 – Représentation d'une image dans les repères cartésiens (à gauche) et log-polaire (à droite).

Rappelons que la transformation d'une image en coordonnées cartésiennes vers des coordonnées log-polaires est donnée par :

$$\begin{cases} \rho &= \log \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2} \\ \gamma &= \tan^{-1} \frac{y - y_c}{x - x_c} \end{cases} \quad (2.4)$$

avec (x_c, y_c) centre de transformation, (x, y) coordonnées cartésiennes des pixels de l'image, (γ, θ) coordonnées log-polaire des pixels de l'image.

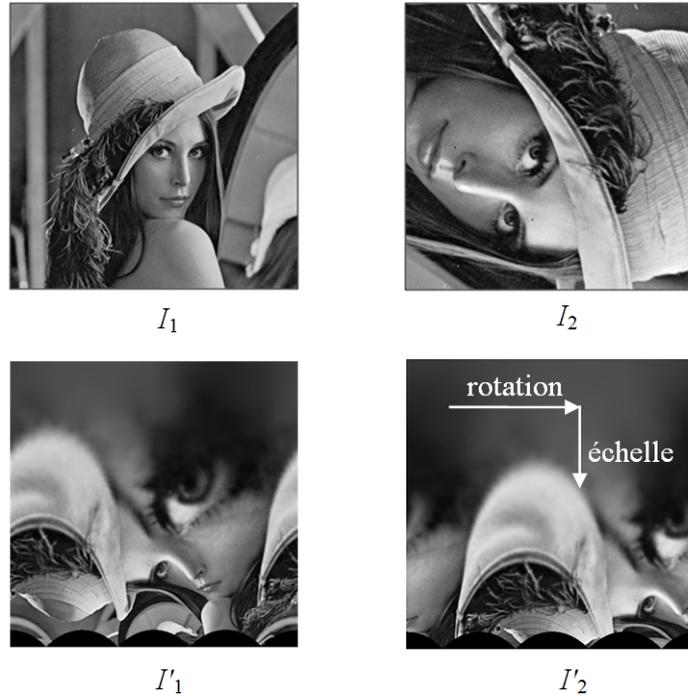


FIGURE 2.4 – I_1 image initiale ; I_2 image obtenue à partir de I_1 par rotation d'angle 110° (centre de rotation au centre de l'image) et agrandie d'un facteur 2 ; I'_1 et I'_2 sont les transformées log-polaires de I_1 et I_2 ; les décalages correspondant à la rotation et au changement d'échelle sont repérés sur l'image.

Ainsi, pour déterminer la rotation et le facteur de changement d'échelle entre deux images I_1 et I_2 , nous recherchons des déplacements par corrélation croisée entre deux images I'_1 et I'_2 (cf. Fig. 2.4) où I'_1 et I'_2 sont les représentations en coordonnées log-polaires de I_1 et I_2 respectivement.

En pratique, pour des images MET, le facteur d'échelle donné par cette méthode n'est souvent pas assez précis. Ce facteur peut être estimé d'une autre manière, par une approche de type "force brute", se décomposant en trois étapes :

1. Création d'images réduites ou agrandies I_2^j de l'image I_2 , $j = 1, \dots, M$.
2. Recherche du score maximum de corrélation entre I_1 et I_2^j

$$\text{Score}^j = \text{Corrélation}(I_1, I_2^j)$$

3. L'échelle recherchée correspond à l'échelle de l'image $I_2^{j^*}$ où :

$$\text{Score}^{j^*} = \max(\text{Score}^j)$$

2.1.2.3 Remarque

Les facteurs (translation, rotation et mise à l'échelle) de recalage retrouvés par les méthodes présentées ci-dessus sont estimés successivement ; par suite la précision du facteur de translation retrouvée va impacter les résultats de rotation et de grandissement (un facteur de translation imprécis fausse totalement le résultat du recalage). Il est évident qu'un recalage précis doit obtenir ces trois facteurs simultanément en garantissant la meilleure similarité dans la région commune aux deux images. Nous allons pour cela utiliser une approche par optimisation, qui maximise la similarité entre deux images, ce que nous allons détailler plus loin dans le paragraphe 2.2.1.

2.1.3 Détermination de l'axe de tilt

La direction de l'axe d'inclinaison de l'objet doit être identifiée précisément avant d'effectuer la reconstruction. Pour une série de tilts, l'objet à travers la série doit suivre une trajectoire qui est perpendiculaire à cet axe d'inclinaison, comme illustré sur la figure 2.5.

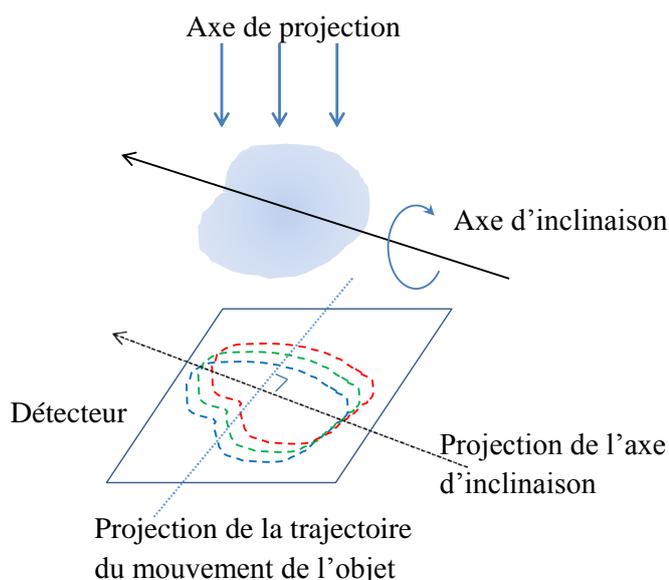


FIGURE 2.5 – Projection de la trajectoire du mouvement de l'objet perpendiculairement à l'axe d'inclinaison.

Si l'étape de pré-alignement est effectuée avec une grande précision, alors la somme de toutes les images de la série pixel par pixel va mettre en évidence la trajectoire de l'objet à travers la série de tilts [Midgley *et al.* (2003)]. Une fois que l'axe de tilt est déterminé, l'ensemble des images peut subir une rotation en sorte que cet axe soit vertical², (*cf.* Fig. 2.6), avant de

2. Les algorithmes de reconstruction habituels nécessitent que cet axe de tilt soit vertical pour effectuer la rétro-projection.

faire la reconstruction tomographique.

Plutôt que d'effectuer la somme de toutes les images :

$$I_p(i) = \sum_{k=1}^M I_k(i) \quad (2.5)$$

avec M le nombre d'images, et i l'indice du pixel.

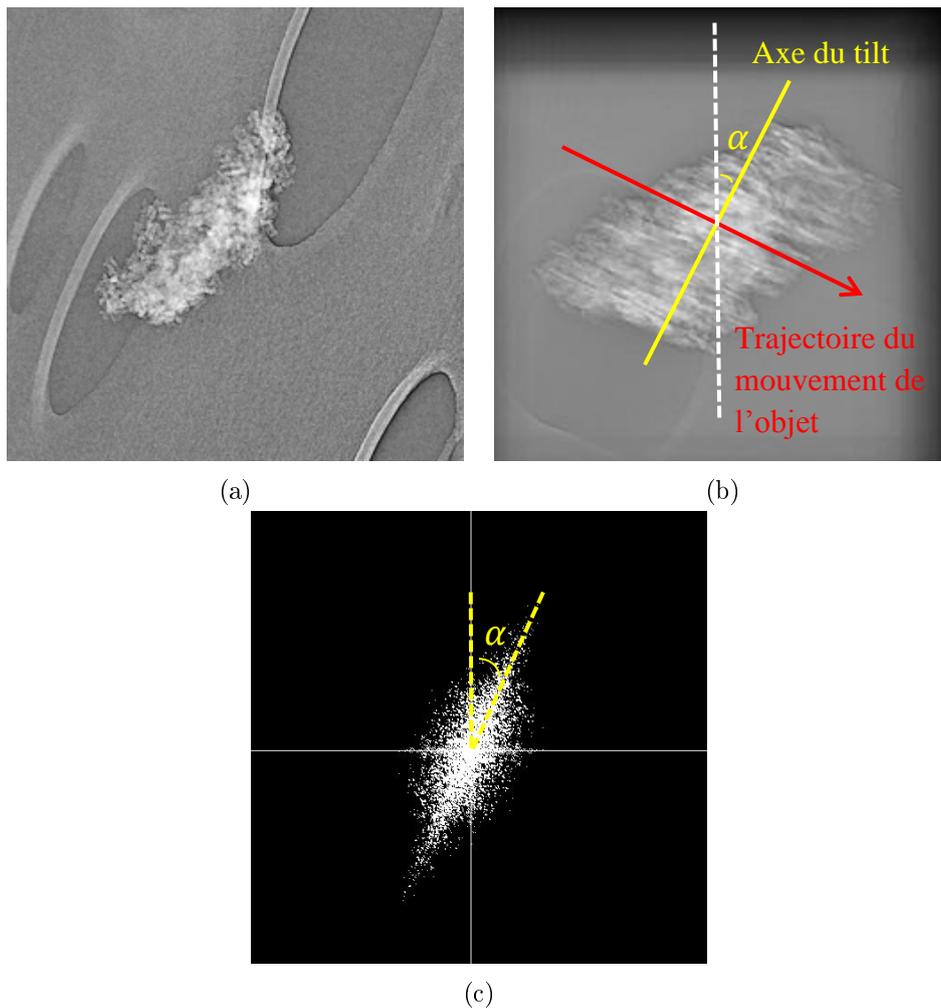


FIGURE 2.6 – (a) Une projection de la série de tilts de fibrilles autoclavées, (b) Image somme de toutes les images pré-alignées par notre méthode (voir Section 2.2.3), (c) Transformée de Fourier de (b) ; α est l'angle de tilt estimé, qui est ensuite utilisé pour faire tourner l'ensemble des images.

que l'on appelle communément Z-projection ; en pratique, on utilisera plutôt leur maximum, rendant l'angle à détecter dans la Z-projection plus visible (*cf.* Fig. 2.7), autrement dit la

Z-projection dans ce cas est reformulée sous la forme :

$$I_p(i) = \max_{k \in \{1, \dots, M\}} I_k(i) \quad (2.6)$$

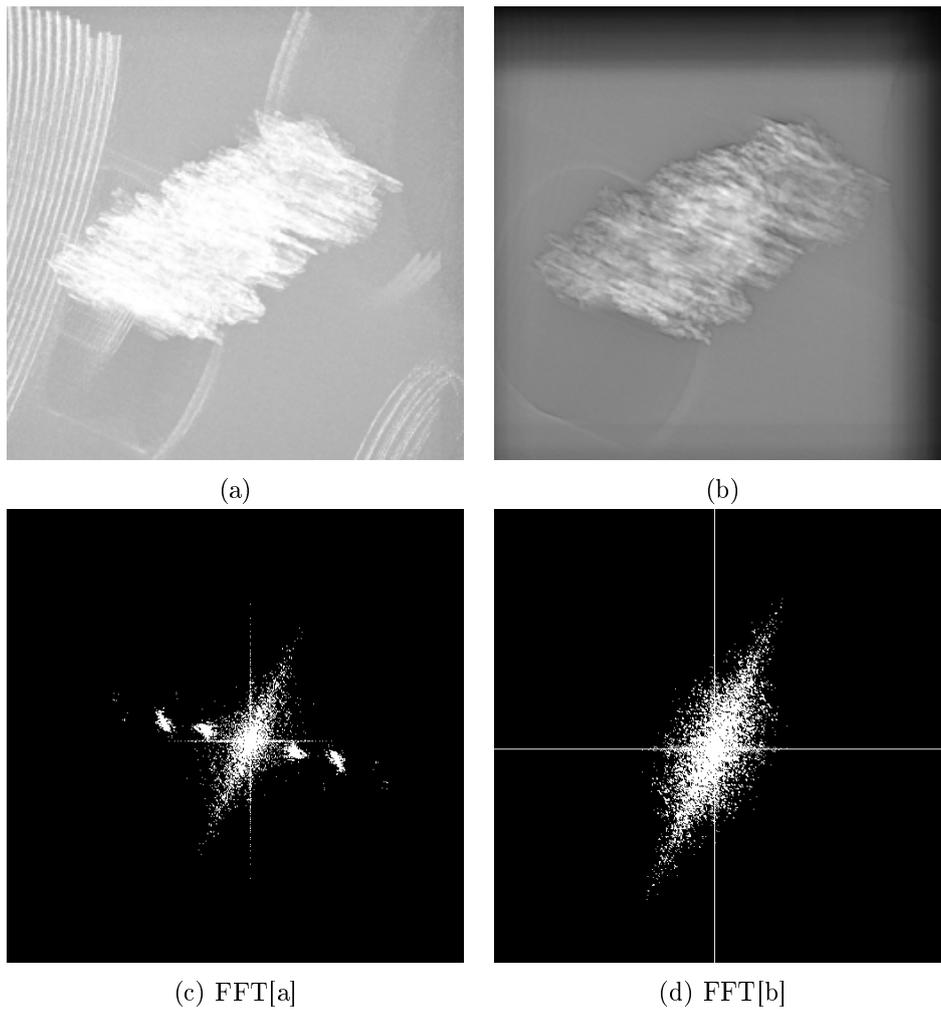


FIGURE 2.7 – (a) Z-projection par maximum, (b) Z-projection par somme, (c) spectre de (a), (d) spectre de (b).

Une fois l'angle α estimé manuellement ou par une régression linéaire sur des données dans l'image du spectre [Kobayashi *et al.* (2009)], nous pouvons faire tourner les images suivant cet angle pour que l'axe de tilt soit vertical. Ensuite, ces images peuvent être utilisées pour effectuer une reconstruction tomographique. L'étape de rotation des images garantit que l'axe de tilt est parallèle à l'axe de rotation du système de reconstruction. En revanche, elle n'assure pas que ces deux axes soient identiques. Un décalage entre ces deux axes introduit des artefacts sous la forme d'arcs dans le tomogramme, qui sont illustrés dans la figure 2.8. L'orientation et le niveau d'intensité de ces arcs dépendent du degré de décalage entre ces deux axes.

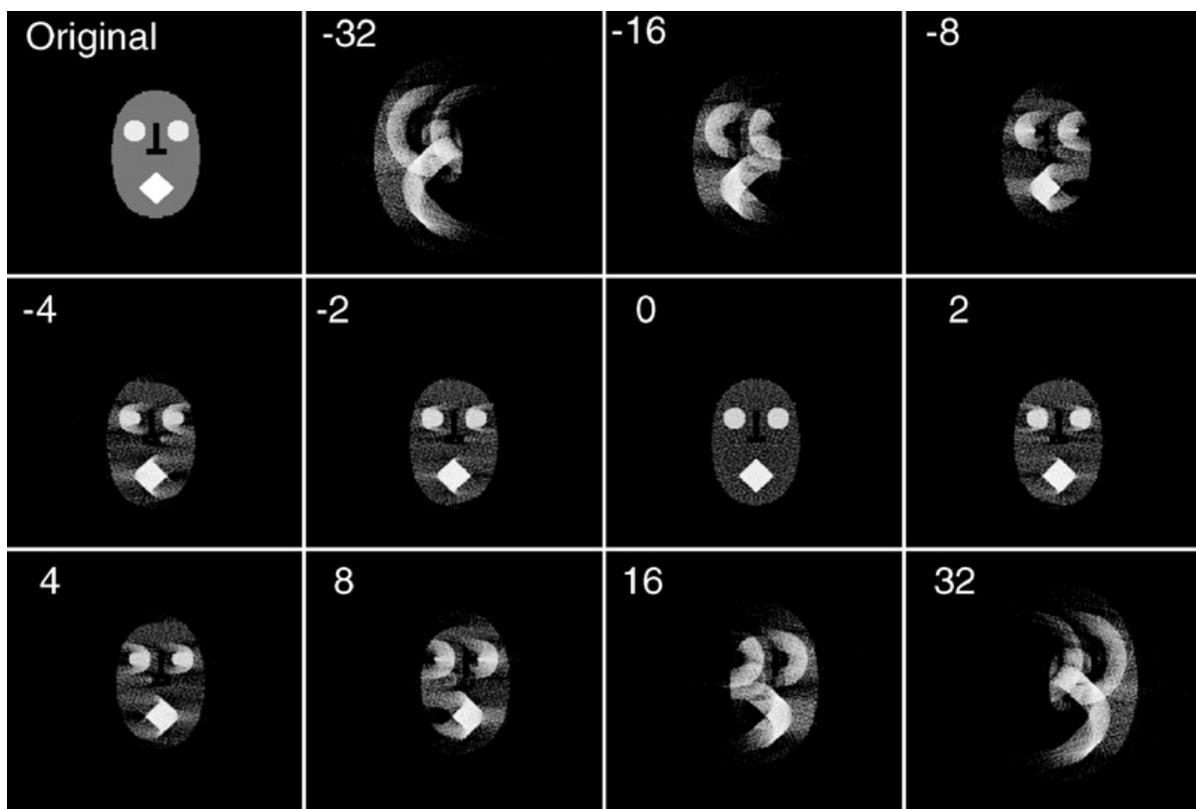


FIGURE 2.8 – Mise en évidence d'effets de décalage de l'axe d'inclinaison sur le tomogramme. L'objet original, à partir duquel les projections ont été générées, est représenté en haut à gauche. Le nombre situé sur chaque image indique le défaut de décalage (translation) en pixels, entre l'axe de tilt et l'axe de rotation du système de reconstruction. Source : [Midgley *et al.* (2003)]

2.1.4 Alignement intégré au processus de reconstruction

Les méthodes d'alignement basées sur le recalage entre projections successives présentent le défaut de propager de proche en proche les erreurs éventuelles. Pour pallier à ce problème, Dengler [Dengler (1989)] a proposé une approche multi-résolution, où les paramètres d'échelle, de rotation et de translation sont déterminés par un algorithme en quatre étapes :

1. Reconstruction d'un premier objet 3D par algorithme FBP ou ART (voir 1.4) à partir des projections initiales sous-résolues.
2. Calcul des projections simulées équivalentes aux vues expérimentales par re-projection du volume.
3. Recalage des projections expérimentales avec celles simulées pour estimer les paramètres d'alignement.
4. Reconstruction à partir des projections alignées.

Les étapes 2 à 4 sont répétées jusqu'à ce que l'alignement ne présente plus d'amélioration notable. Un processus similaire est ensuite appliqué à une résolution plus importante en utilisant, comme solution initiale, le résultat obtenu à partir des projections sous-résolues. Le processus est itéré jusqu'à la résolution des projections expérimentales initiales. Cette méthode étant basée sur une approche multi-résolution, la première reconstruction est exécutée avec des projections de très basse résolution (la taille de chaque dimension des projections est environ de 5 à 20 pixels) garantissant que l'erreur d'alignement relative est approximativement de l'ordre du pixel.

En pratique, le résultat de cette méthode est imprécis car l'approche multi-résolution n'est pas un bon point de départ du fait des décalages importants en translation entre les projections. Dans des travaux plus récents [Owen et Landis (1996)], [Winkler *et al.* (2006)], [Houben et Bar Sadan (2011)], les auteurs ajoutent une étape de pré-alignement pour initialiser le processus d'alignement. Ce processus utilise uniquement les projections en résolution initiale, les paires d'image étant recalées par une approche basée sur la corrélation croisée.

Nous avons évoqué dans le paragraphe 2.1.2.3 le fait que les méthodes de recalage d'images basées sur la corrélation n'étaient pas efficaces pour estimer les quatre facteurs de transformation. Pour améliorer la qualité d'alignement, il est nécessaire de développer une nouvelle méthode. Dans la partie suivante, nous commençons par une description de notre méthode pour recalibrer deux images, que l'on peut considérer comme la base du processus d'alignement. Ensuite, nous présenterons de manière plus détaillée comment utiliser cette méthode pour pré-aligner une série d'images (recalage de proche en proche).

2.2 Pré-recalage des projections

L'alignement des projections avant reconstruction nécessite l'élaboration d'une méthode de recalage entre deux images, en termes de translations horizontale et verticale, de rotation et de changement d'échelle.

2.2.1 Recalage d'une paire d'images par optimisation

Nous proposons une méthode qui est plus robuste que les approches fondées sur la recherche du maximum de corrélation (voir Annexe A). Son principe est d'estimer les quatre paramètres de transformation de l'image à recalier I_t à partir de l'image de référence I_r , et d'appliquer une transformation RST (Rotation-Scale-Translation *cf.* Paragraphe 2.2.2) à I_t pour retrouver l'image alignée I_a .

Cette méthode est basée sur la minimisation de l'erreur quadratique moyenne (EQM) entre I_r et I_t :

$$\Delta\phi^* = \arg \min_{\Delta\phi} E(\Delta\phi) \quad (2.7)$$

avec :

$$E(\Delta\phi) = \frac{1}{N_{\Delta\phi}} \sum_{u \in Z_{\Delta\phi}} [I_r(u) - (R_{\Delta\phi} \cdot I_t)(u)]^2 \quad (2.8)$$

où u sont les coordonnées des pixels, $R_{\Delta\phi}$ est un opérateur linéaire interpolant son argument afin d'appliquer une transformation géométrique de l'image spécifiée par les paramètres $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$ correspondant respectivement aux décalages horizontal et vertical d'une translation, à l'angle de rotation et à l'échelle de grandissement (voir paragraphe 2.2.2). $N_{\Delta\phi}$ est le nombre de pixels du domaine d'intérêt $Z_{\Delta\phi}$ (*cf.* Fig. 2.9).

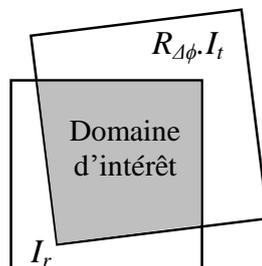


FIGURE 2.9 – Le domaine d'intérêt ($Z_{\Delta\phi}$ en grisé) est défini par l'intersection des deux images.

L'algorithme du "Simplex" de Nelder & Mead [Nelder et Mead (1965)], implémenté comme décrit dans [Lagarias *et al.* (1998)], est utilisé pour résoudre le problème de minimisation (2.7)

après une étape d'initialisation (décrite plus loin) pour garantir que l'algorithme de Nelder & Mead puisse être initialisé à une proximité raisonnable du minimum global du critère. Cette méthode d'optimisation sans dérivée évalue de manière itérative $E(\Delta\phi)$ jusqu'à ce qu'un minimum soit trouvé. En changeant la définition de $E(\Delta\phi)$, notre approche peut être facilement adaptée à un grand nombre de problèmes similaires. Par exemple, nous avons modifié notre méthode en utilisant l'indice SSIM (Structural SIMilarity) [Wang *et al.* (2004)] pour trouver les meilleurs paramètres. Nous avons cependant constaté que l'algorithme résultant est instable pour certaines paires d'images. Pour cette raison, nous recommandons d'utiliser le critère EQM donné dans l'équation (2.8).

L'étape d'initialisation mérite quelques explications. Les décalages $\Delta u_x, \Delta u_y$ sont pré-estimés par corrélation croisée. Pour notre application, nous pouvons restreindre la transformation de translation à $\Delta u_x \in [-W/2, W/2]$ et $\Delta u_y \in [-H/2, H/2]$ avec W, H largeur et hauteur de l'image respectivement. Les paramètres de rotation et d'échelle entre deux images d'angles de tilt successifs sont très faibles : $\Delta\varphi$ ne dépasse pas $\pm 2^\circ$ et Δs est de l'ordre de $\pm 0.5\%$; ce qui nous amène à initialiser l'algorithme avec $\Delta\varphi^{[0]} = 0$, $\Delta s^{[0]} = 0$ (ni rotation ni changement d'échelle).

Nous pouvons noter que, comme $R_{\Delta\phi}$ est un opérateur d'interpolation dépendant continûment des paramètres $\Delta\phi$, la minimisation de $E(\Delta\phi)$ permet d'obtenir une précision "sous-pixel" pour les paramètres de décalage.

2.2.2 Transformation RST (Rotation Scale Translation)

L'opérateur linéaire $R_{\Delta\phi}$ dans l'équation (2.8) correspond au changement de coordonnées donnée par la matrice :

$$M_{\Delta\phi} = \begin{bmatrix} (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & (s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & \Delta u_x \\ -(s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & \Delta u_y \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

qui dépend de $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$. La relation :

$$\begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & (s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & \Delta u_x \\ -(s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & \Delta u_y \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

transforme les coordonnées $u = (u_x, u_y)^\top$ de l'image initiale en les coordonnées $v = (v_x, v_y)^\top$ de l'image transformée. Très souvent, les coordonnées (v_x, v_y) ne correspondent pas à une position exacte d'un pixel, c'est-à-dire des coordonnées entières. Une interpolation doit donc être effectuée pour estimer le niveau de gris à la position (v_x, v_y) sur l'image transformée. À cet effet, trois méthodes d'interpolation ont été testées :

- Plus proche voisin : le niveau de gris estimé est choisi comme celui du pixel le plus proche.
- Bilinéaire : le niveau de gris estimé est la moyenne pondérée des niveaux de gris des quatre pixels voisins.
- B-spline : le niveau de gris estimé est l'interpolation par B-spline cubiques entre les pixels voisins [Thévenaz *et al.* (2000)].

La comparaison des méthodes d'interpolation avec des tests d'interpolations successives (cf. Fig.2.10) montre que l'interpolation par B-spline est la méthode entraînant le moins de dégradation. Cette méthode est systématiquement employée pour interpoler nos données dans la suite du mémoire.



FIGURE 2.10 – (a) Test comparatif des trois méthodes d'interpolation. L'image est tournée d'un angle total de 360° par pas de 10° avec les trois méthodes d'interpolation. (c-d) : les résultats donnés par interpolation de type "plus proche voisin", $SSIM(a,b)=0,81$; Biliéaire, $SSIM(a,c)=0,85$ et par B-spline cubiques, $SSIM(a,d)=0,87$. La dernière méthode est celle présentant clairement le moins de dégradations.

2.2.3 Recalage de proche en proche

Passons maintenant au cas d'une série de projections. Une première image est choisie comme image de référence. En appliquant notre méthode d'alignement pour deux images, chaque image est recalée par rapport à la précédente de la série ; ainsi les décalages sont compensés séquentiellement dans toute la série. Cette méthode minimise la fonction de coût suivante :

$$E(\Phi) = \sum_{k=1}^{M-1} \left(\frac{1}{N_{\Delta\phi_k}} \sum_{u \in Z_{\Delta\phi_k}} [I_k(u) - (R_{\Delta\phi_k} \cdot I_{k+1})(u)]^2 \right) \quad (2.11)$$

où M est le nombre d'images dans la séquence de projections, $N_{\Delta\phi_k}$, le nombre de pixels dans le domaine d'intérêt entre I_k et I_{k+1} , et Φ l'ensemble des vecteurs de paramètres de transformation :

$$\Phi = \{\Delta\phi_k\}_{k=1}^{M-1} \quad (2.12)$$

La fonction (2.11) étant séparable, les paramètres $\Delta\phi_k = (\Delta u_{k,x}, \Delta u_{k,y}, \Delta\varphi_k, \Delta s_k)$ associés à chaque paire d'images peuvent être déterminés indépendamment (en parallèle) les uns des autres. La figure 2.11 représente la relation entre les paramètres de transformation dans une série d'images.

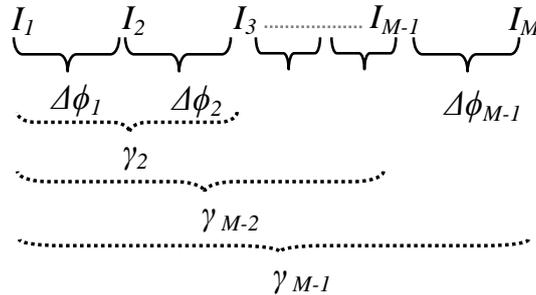


FIGURE 2.11 – Correspondance entre les paramètres de transformation de la série d'images.

Dans cette figure, $\gamma_k = (u_{k,x}, u_{k,y}, \varphi_k, s_k)$, $k = 1, \dots, M - 1$ sont les paramètres de pseudo-transformation entre les images $2, \dots, M$ et la première image (référence). Les composantes γ_t sont :

$$\begin{cases} u_{k,x} &= \text{Coeff. (1,3) de la matrice } R_k \\ u_{k,y} &= \text{Coeff. (2,3) de la matrice } R_k \\ \varphi_k &= \sum_{i=1}^k \Delta\varphi_i \\ s_k &= \prod_{i=1}^k \Delta s_i \end{cases} \quad (2.13)$$

avec $R_{\gamma_k} = R_{\Delta\phi_k} \cdot R_{\Delta\phi_{k-1}} \cdots R_{\Delta\phi_1}$.

La série pré-alignée est obtenue en appliquant les paramètres γ à la série d'images. Comme la première image sert de référence, cette image n'est pas recalée. Les images recalées (à partir

de la deuxième image de la série) sont obtenues par l'opération suivante :

$$I'_k = R_{\gamma_{k-1}} \cdot I_k \quad (2.14)$$

avec I' - image recalée ; $k = 2, \dots, M$.

Nous avons mentionné dans le paragraphe 2.1.2 que les projections générées avec une approche de recalage de proche en proche présentent un défaut d'alignement dû à une accumulation des erreurs. Une reconstruction tomographique à partir de ces projections présente des artefacts car (i) l'alignement est grossier et (ii) l'axe de tilt est décalé par rapport au centre de rotation (*cf.* Paragraphe 2.1.3). Pour retrouver une bonne estimation du volume reconstruit, nous pouvons corriger les deux problèmes (i) et (ii) par une optimisation alternée, qui est une variation de l'optimisation globale (*cf.* Section 1.4.4). Cette optimisation alternée permet de raffiner le recalage des projections et donc d'aligner également l'axe de tilt.

2.3 Optimisation alternée

À partir des projections pré-alignées, notre méthode consiste à optimiser alternativement les voxels f aux paramètres de positionnement ϑ fixés, puis les paramètres ϑ aux voxels f fixés. Il s'agit donc d'alterner l'étape de reconstruction, (*cf.* équation 1.31) et celle de recalage. Comme les voxels sont considérés comme fixes pendant les étapes de recalage, ces étapes peuvent être effectuées en parallèle pour chacune des projections.

1. **Initialisation.** Choix des paramètres de positionnement initiaux³ $\vartheta^{[0]}$ et $\tau = 0$.

2. **Reconstruction.** Reconstruction des voxels aux paramètres $\vartheta^{[\tau]}$ fixés :

$$f^{[\tau+1]} = \arg \min_f J(f, \vartheta^{[\tau]}) \quad (2.15)$$

3. **Alignement.** Recherche (pour chaque projection) des meilleurs paramètres de positionnement, les voxels étant fixes et égaux à $f^{[\tau+1]}$:

$$\vartheta^{[\tau+1]} = \arg \min_{\vartheta} J(f^{[\tau+1]}, \vartheta)$$

Pour une fonction de coût J séparable comme dans l'équation (1.29), les paramètres ϕ_k associés à chaque projection peuvent être déterminés indépendamment (en parallèle) les uns des autres :

$$\phi_k^{[\tau+1]} = \arg \min_{\phi_k} J_k(f, \phi_k) + c_k(\phi_k), \quad (2.16)$$

où les $c_k(\phi_k)$ introduisent des connaissances *a priori* sur ϕ_k .

3. Ce choix est fait en sorte que l'axe de tilt soit vertical (voir ce qui a été dit précédemment dans le paragraphe 2.1.3).

Les résultats sont regroupés :

$$\vartheta^{[\tau+1]} = \left\{ \phi_k^{[\tau+1]} \right\}_{k=1}^M .$$

4. **Test de convergence.** Si la méthode a convergé (par exemple si l'amplitude maximale des paramètres d'alignement de translation est inférieure à 1 pixel pour deux itérations consécutives), arrêter, sinon itérer en recommençant à l'étape 2.

2.4 Traitement des défauts de focalisation

Dans la section 1.3.1, nous avons évoqué le fait que certaines images pouvaient être floues dans une série de projections (*cf.* Fig 1.14) en raison d'un léger déplacement du porte-objet suivant l'axe optique, causant une mauvaise mise au point. Ces flous peuvent influencer directement le résultat d'alignement et ainsi la qualité du volume reconstruit. La restauration de ces projections sera une étape préalable pour améliorer la précision du recalage.

Les méthodes standards de filtrage linéaire (filtrage inverse) ne fournissent que des images de qualité limitée en termes de résolution et s'accompagnent d'un problème d'amplification des hautes fréquences (amplification du bruit). Une méthode plus appropriée remontant à une vingtaine d'années est devenue d'usage courant ; elle consiste à introduire un terme de régularisation lors de la déconvolution. On pourra trouver dans la littérature plusieurs revues de l'état de l'art [Demoment *et al.* (2001)], [Thiébaud (2005)], [Campisi et Egiazarian (2007)] dans ce domaine.

En principe, l'objet d'intérêt ne peut pas être observé directement mais au travers d'un système de mesure généralement imparfait, affecté par des perturbations (*cf.* Fig. 2.12) et donc conduisant à former des images dégradées.

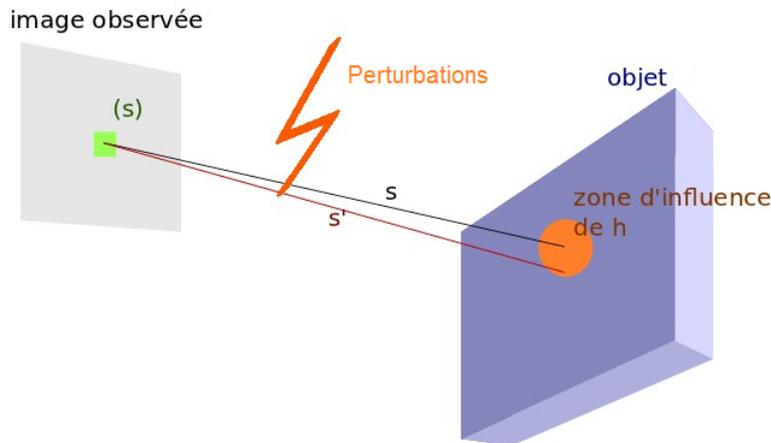


FIGURE 2.12 – Illustration du système de formation d'image.

Le lien entre l'image initiale et l'image observée $p(s)$ dans une direction s est donné par l'équation de formation de l'image :

$$p(s) = \int h(s|s')f(s')ds' + e(s) \quad (2.17)$$

où

- $f(s')$ est la distribution de l'intensité de l'objet.
- $h(s|s')$ est la réponse impulsionnelle (PSF-Point Spread Function), donnant la distribution d'intensité observée en s pour une source ponctuelle placée en s' . Elle caractérise les perturbations (ou déformations) du système de formation d'image, pour lequel, par exemple, l'image d'un point n'est pas un point mais une tache floue.
- $e(s)$ représente un terme d'erreur rendant compte du bruit (source et détecteur).

Si l'on considère que la PSF est invariante par translation quand la distance entre s et s' est suffisamment petite, on peut alors écrire :

$$h(s|s') = h(s - s') \quad (2.18)$$

Dans ce cas, l'équation 2.17 fait apparaître un produit de convolution :

$$p(s) = \int h(s - s')f(s') ds' + e(s) \quad (2.19)$$

$$= (h * f)(s) + e(s) \quad (2.20)$$

Lorsque les données sont discrétisées sur un nombre fini de pixels, l'équation 2.20 peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} p &= h * f + e \\ &= \text{TF}^{-1} [\hat{h} \cdot \hat{f}] + e \end{aligned} \quad (2.21)$$

avec \hat{h} et \hat{f} les transformées de Fourier discrètes de h et f respectivement.

La restauration d'image à partir de l'équation 2.21 s'appelle déconvolution, qui est un problème inverse mal conditionné comme le problème de la reconstruction tomographique. La résolution de ce problème consiste à estimer le mieux possible une approximation de f à partir des données p disponibles.

La recherche algorithmique en restauration d'image est extrêmement riche (*cf.* revues état de l'art citées un peu avant). Dans le cas où un calibrage de la PSF est impossible ou très difficile, comme par exemple en astronomie, une solution peut être trouvée par une méthode de déconvolution aveugle, ne demandant aucune connaissance de la PSF. Cette méthode va permettre de retrouver des approximations de h et f automatiquement [Thiébaud (2005)]. La déconvolution aveugle présente cependant quelques inconvénients. Concrètement, cette mé-

thode est plus difficile à appliquer (demandant une optimisation globale de h et f) et, dans la pratique, elle nécessite un temps de calcul plus important par rapport à celui de la déconvolution conventionnelle.

Dans le cas où le flou de défocalisation est important, on trouve dans la littérature des façons d'approcher la PSF par des modèles de formes simples : un disque [Goudail *et al.* (2000)], une gaussienne généralisée [Claxton et Staunton (2008)], [Ketcham *et al.* (2010)], etc... À partir de la connaissance d'un modèle de PSF, nous utilisons une technique de déconvolution "myope", développée dans le cadre du projet MiTiV (<http://mitiv.univ-lyon1.fr/>). Dans cette technique, nous fixons tout d'abord un type de PSF (Gaussienne, ou Lorentzienne, ou fonction d'Airy, ou Moffat, etc...). Ensuite, le critère GML (Generalized Maximum Likelihood) est utilisée pour optimiser la taille de cette PSF [Thibon (2013)]. Enfin, la restauration d'image est effectuée par l'optimisation suivante :

$$\begin{aligned} f^{\text{dev}} &= \arg \min_f \xi(f, h | p) \\ &= \arg \min_f \xi_{\text{data}}(f * h | p) + \lambda \xi_{\text{prior}}(f) \end{aligned} \quad (2.22)$$

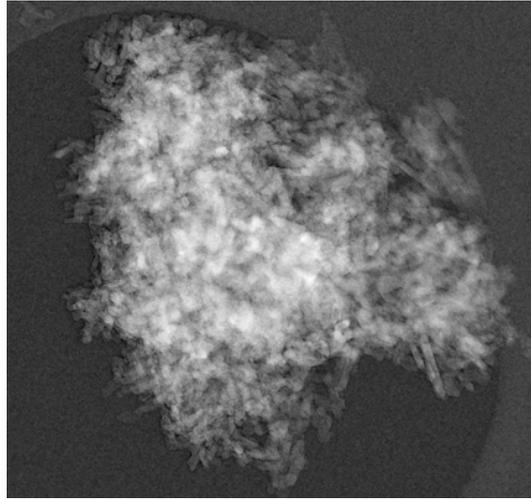
où $\xi_{\text{data}}(f, h)$ est un terme d'attache aux données p , λ est donné par le critère GML et $\xi_{\text{prior}}(f)$ est une fonction de régularisation sur l'objet. La version actuelle du code utilise un critère quadratique en f avec :

$$\xi_{\text{data}}(f * h | p) = \|h * f - p\|_2^2 \quad (2.23)$$

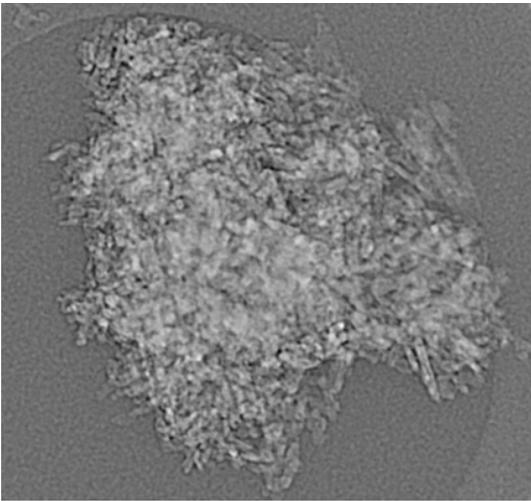
$$\xi_{\text{prior}}(f) = \|D \cdot f\|_2^2 \quad (2.24)$$

où D est un opérateur de type différences finies tel que $D \cdot f$ approxime le gradient spatial de f . Pour améliorer la méthode, nous envisageons d'utiliser plutôt la variation totale (TV) plus adaptée au type d'objets observés.

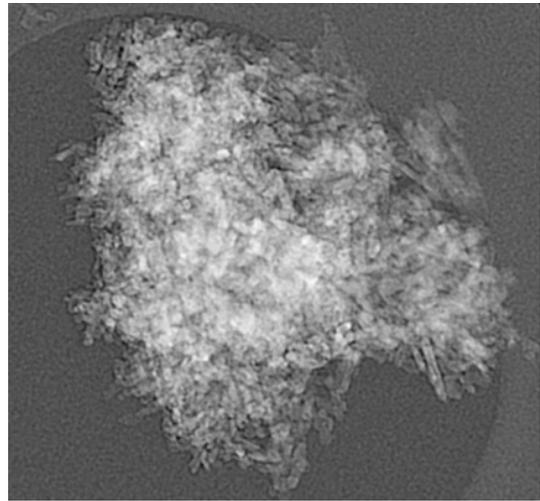
Nous montrons dans la figure 2.13, un exemple d'utilisation de cette méthode pour restaurer une projection floue. La figure 2.13e représente le meilleur résultat visuel correspondant à la déconvolution de l'image 2.13a par une PSF de la forme d'une tache d'Airy.



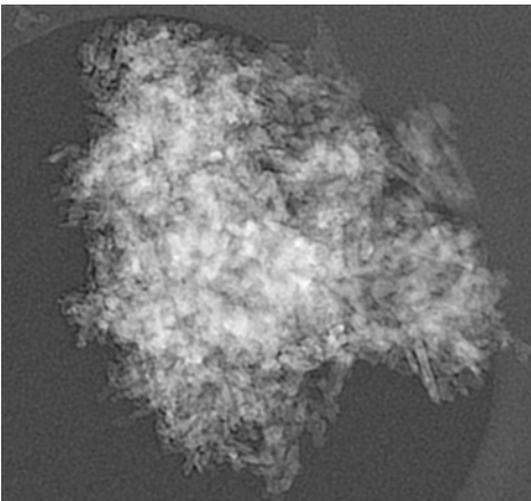
(a) Projection originale



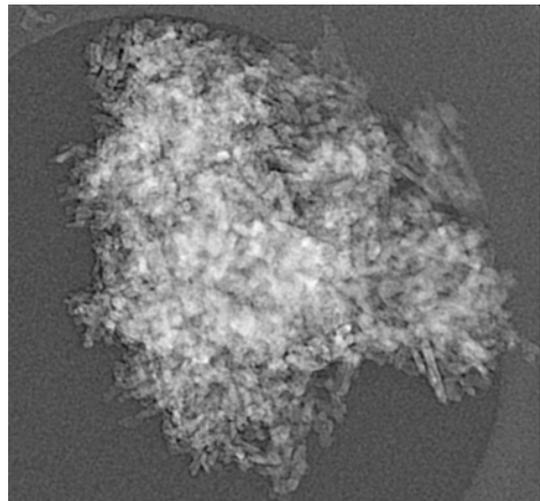
(b) Lorentzienne, $\lambda = 0.0020$, $fwhm=2.1$



(c) Moffat, $\lambda = 0.035$, $fwhm=2.4$



(d) Gaussienne, $\lambda = 0.072$, $fwhm=0.77$



(e) Airy, $\lambda = 0.036$, $fwhm=0.78$

FIGURE 2.13 – Exemple de restaurations d'images (512×512 , $0,66$ nm/pixel) utilisant différents types de PSF ; le poids de régularisation λ et la largeur à mi-hauteur de la PSF ($fwhm$ pour *Full-Width at Half Maximum*, en pixels) sont déterminés en optimisant le critère GML.

2.5 Validation

Pour les résultats suivants, nous utilisons une série de projections de MET de poudre d'une zéolithe (CBV712 de Zeolyst). Notre algorithme a été implanté et testé dans le langage Yorick (<http://yorick.sourceforge.net/>) sur une machine 2.6-GHz Intel Core 2 Duo. Le temps de calcul nécessaire pour recalibrer une paire d'images varie en fonction de leur taille et de leur richesse texturale.

2.5.1 Recalage d'une paire d'images par optimisation

Dans cette partie, nous simulons un décalage d'image par la création d'une image transformée (I_t) en appliquant une transformation $R_{\Delta\phi}$ à une image (I_r) considérée comme image d'origine. Ensuite, nous appliquons notre méthode de recalage pour déterminer des paramètres de transformation, qui ont été appliqués à I_r . La confiance envers les paramètres estimés est quantifiée par le calcul du facteur SSIM dans le domaine d'intérêt entre I_r et I_a , l'image recalée.

2.5.1.1 Cas sans bruit

Dans un premier test, nous utilisons une image en 256 niveaux de gris de taille 256×256 pixels (*cf.* Fig. 2.14a), considérée comme l'image de référence I_r . L'image I_t est créée en appliquant une transformation $R_{\Delta\phi}$ à I_r avec $\Delta\phi = (-5, 5, -10^\circ, -3\%)$. Le facteur $\text{SSIM}(I_r, I_t)$ initial vaut à 0,85. Une fois I_r et I_t alignées, l'image résiduelle (différence entre I_a et I_r) est montrée dans la figure 2.14b, et le $\text{SSIM}(I_r, I_a)$ vaut 0.99.

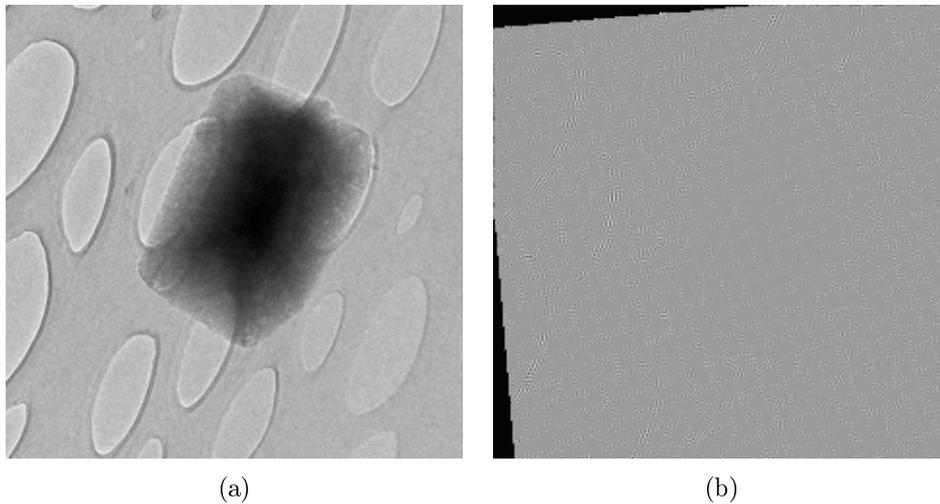


FIGURE 2.14 – (a) Image d'un support catalyseur de zéolithe (256×256 , 4,41 nm/pixel), utilisant comme image de référence I_r , (b) Résidu entre l'image de référence I_r et l'image alignée I_a .

Revenons au cas des images de TEM où $\Delta\phi$ et Δs sont très petits. Nous générons une série de 140 transformations aléatoires, chacune composée d'une variation : $\Delta u_x, \Delta u_y \in [-30, 30]$,

$\Delta\varphi \in [-0.5, 0.5]$, $\Delta s \in [-0.01, 0.01]$. Nous appliquons ces transformations à I_r pour créer une série de M images de test. Chaque image de test est recalée avec I_r . La précision des translations retrouvées ($\Delta u_{k,x}^*$, $\Delta u_{k,y}^*$) est donnée par le calcul de l'erreur moyenne de décalage :

$$\overline{\Delta_{\text{shift}}} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \underbrace{\sqrt{(\Delta u_{k,x} - \Delta u_{k,x}^*)^2 + (\Delta u_{k,y} - \Delta u_{k,y}^*)^2}}_{\Delta_{\text{shift}}} \quad (2.25)$$

pour la rotation estimée ($\Delta\varphi_k^*$) et le facteur de l'échelle (Δs_k^*) :

$$\overline{\Delta_{\text{rotation}}} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sqrt{(\Delta\varphi_k - \Delta\varphi_k^*)^2} \quad (2.26)$$

$$\overline{\Delta_{\text{scale}}} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sqrt{(\Delta s_k - \Delta s_k^*)^2} \quad (2.27)$$

M est le nombre d'images. Les résultats sont présentés dans le Tableau 2.1.

2.5.1.2 Cas avec bruit

Dans ce test, l'image I_t (voir Fig. 2.15a) est créée en appliquant une transformation $R_{\Delta\phi}$ à I_r (voir Fig. 2.14a), avec $\Delta\phi = (-5, 5, -10^\circ, -3\%)$ et en ajoutant un bruit gaussien de moyenne nulle et d'écart-type $\sigma = 5.0$. Le facteur $\text{SSIM}(I_r, I_t)$ est égal à 0,85. Une fois I_r et I_t alignées, l'image résiduelle est très satisfaisante (*cf.* Fig. 2.15b), avec $\text{SSIM}(I_r, I_a) = 0.97$.

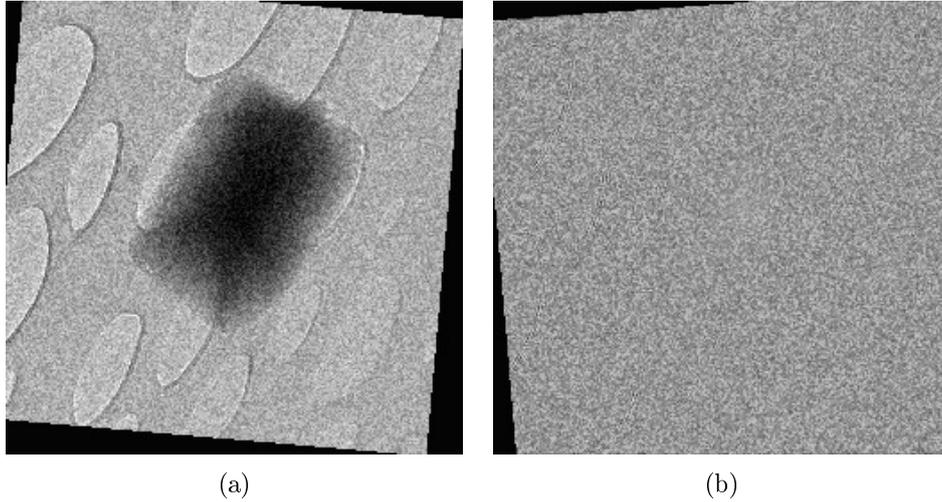


FIGURE 2.15 – (a) Image à recaler, (b) Image résidu entre I_r et I_a .

Nous ajoutons maintenant un bruit gaussien ($\sigma = 5.0$) à chaque image de la série d'images de test, déjà utilisée dans la Section 2.5.1.1. Les images générées sont ensuite recalées avec I_r . Les résultats obtenus sont présentés dans le Tableau 2.1.

TABLE 2.1 – Précision des translations, rotations et échelles estimées.

	$\overline{\Delta_{\text{shift}}}$ [pixel]	$\overline{\Delta_{\text{rotation}}}$ [°]	$\overline{\Delta_{\text{scale}}}$ [%]
Cas sans bruit	0.187	6.7×10^{-3}	8.8×10^{-4}
Cas avec bruit Gaussien ($\sigma = 5.0$)	0.262	1.9×10^{-2}	3.4×10^{-3}

La figure 2.16 illustre des erreurs moyennes de décalage correspondant aux différentes valeurs d'écart-type σ du bruit gaussien ajouté. Pour chacune des valeurs de σ , nous présentons également le rapport signal sur bruit⁴ (SNR) exprimé en [dB] correspondant. Les intervalles de confiance $\left[\overline{\Delta_{\text{shift}}} - 1,96 \frac{\sigma(\Delta_{\text{shift}})}{\sqrt{M}}, \overline{\Delta_{\text{shift}}} + 1,96 \frac{\sigma(\Delta_{\text{shift}})}{\sqrt{M}} \right]$ sont également montrés ; Où $\sigma(\Delta_{\text{shift}}) = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (\Delta_{\text{shift}_i} - \overline{\Delta_{\text{shift}}})^2}$. Cette figure montre que notre algorithme d'alignement fournit des résultats satisfaisants (ayant une précision du sous-pixel) même dans les cas où les bruits sont importants (correspondant à un SNR faible).

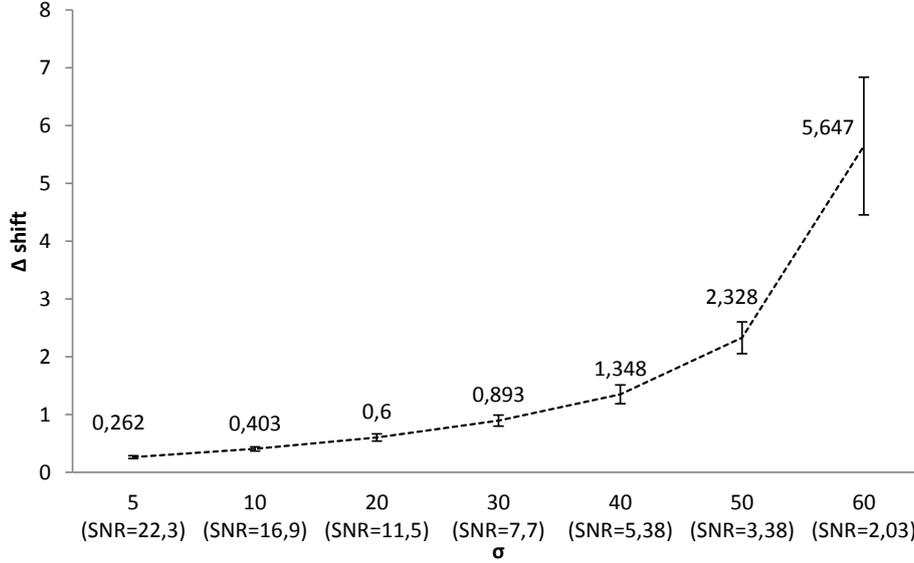


FIGURE 2.16 – Erreur moyenne de décalage aux différentes valeurs de bruit.

2.5.2 Recalage d'une série de projections réelles

Dans cette partie, nous nous intéressons à aligner une série de projections réelles d'une zéolithe en appliquant notre méthode de recalage de proche en proche (*cf.* Section 2.2.3). La série contient 142 projections, l'angle d'inclinaison θ varie de -71° à $+70^\circ$ par pas de 1° . La projection correspond à $\theta = -71^\circ$, choisie comme référence, est présentée dans la Figure 2.14a. Nous avons comparé notre méthode à la méthode standard RobustFFT (voir Section 2.1.2), qui

4. $\text{SNR} = 10 \log_{10}(\text{Var}^2(O)/\text{Var}^2(N))$ où $\text{Var}(O)$ et $\text{Var}(N)$ sont respectivement la variance d'image originale et du bruit ajouté.

effectue un recalage séquentiel en translation, rotation et grandissement. L'interpolation par B-splines cubiques [Thévenaz *et al.* (2000)] a été utilisée pour toutes les procédures d'interpolation.

La Figure 2.17 représente les résultats obtenus (plus le score est élevé, meilleur est le recalage) : les symboles (■) représentent la variation du facteur SSIM entre les paires de projections successives recalées par RobustFFT et les symboles (●) et la courbe continue (—) représentent les facteurs SSIM obtenus par notre méthode basée sur la minimisation de l'EQM, ou la maximisation du facteur SSIM respectivement. Notre méthode d'alignement donne systématiquement une similarité plus élevée entre l'image de référence et l'image enregistrée que l'approche basée sur la corrélation séquentielle.

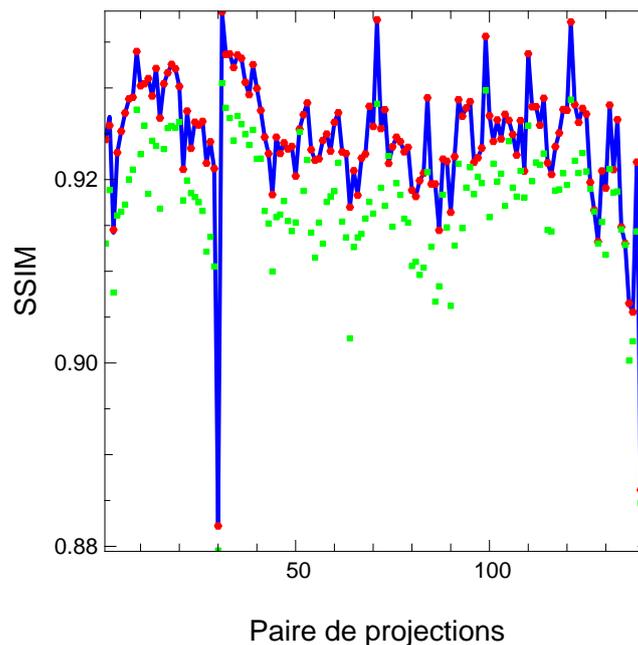


FIGURE 2.17 – Valeurs de l'indice SSIM pour les recalages obtenus par la méthode standard RobustFFT (■) et par notre méthode proposée basée sur la minimisation de l'EQM (●), ou la maximisation du facteur SSIM(—). Nous pouvons noter systématiquement un score plus élevé avec notre méthode.

Nous montrons dans la Figure 2.18 les facteurs d'EQM correspondant à l'alignement de chaque paire d'images par des méthodes différentes. Cette figure illustre clairement que notre méthode produit moins d'erreurs.

Selon les deux figures 2.17 et 2.18, nous concluons que l'estimation des meilleurs paramètres de transformation en minimisant l'EQM ou en maximisant le facteur SSIM sont essentiellement équivalentes, tandis que la précision obtenue avec un procédé séquentiel basé sur la corrélation est plus faible.

Pour chaque paire d'images, notre méthode converge en environ 70 itérations, avec un temps de calcul total de 6,5 s, tandis que la méthode basée sur RobustFFT demande un temps de calcul de 4 s.

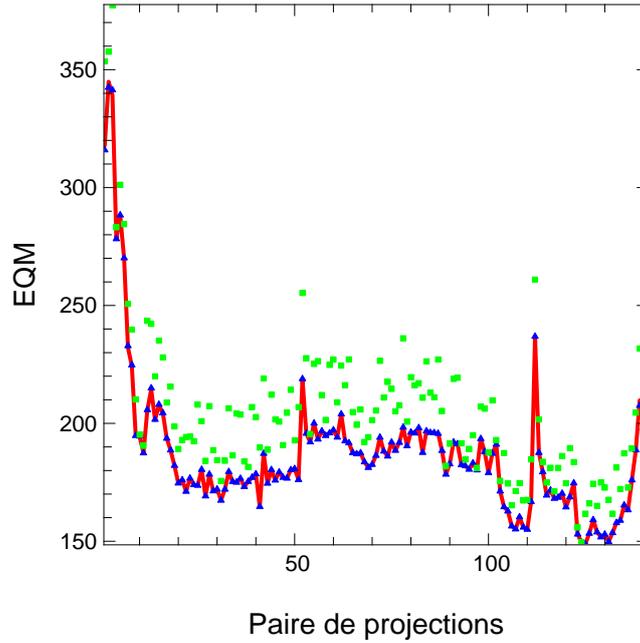


FIGURE 2.18 – Valeurs de l’indice d’EQM pour les recalages obtenus par la méthode standard RobustFFT (■) et par notre méthode basée sur la minimisation d’EQM(▲), ou la maximisation du facteur SSIM (—). L’erreur est, dans tous les cas, plus faible avec notre méthode.

2.5.3 Recalage fin par optimisation alternée

Dans cette section, nous décrivons des résultats expérimentaux obtenus par les essais de notre méthode en utilisant deux jeux de données : des données synthétiques simulées et des séries de projections MET. Le temps de calcul requis pour le processus d’optimisation alternée dépend du temps nécessaire pour l’alignement et du temps nécessaire pour une reconstruction.

2.5.3.1 Test de notre algorithme avec des données de simulation

Nous prenons comme volume de simulation un objet binaire ressemblant à une nanoparticule support de catalyseur. Ce volume a été obtenu à partir d’une nanoparticule reconstruite par segmentation en 2 phases. La figure 2.19a représente une section transversale de l’échantillon, orthogonale à l’axe d’inclinaison. La série contient 142 projections simulées (256×256 pixels), calculées de -71° à $+70^\circ$ par pas angulaires de $+1^\circ$. Pour simuler des images décalées en raison des déplacements du porte-échantillon, chaque image de la série est aléatoirement transformée par des décalages horizontaux et verticaux inférieurs à $\pm 30\%$ de la dimension de l’image, des légères rotations (ne dépassant pas $\pm 0.5^\circ$) et par de petits changements de grandissement dans l’intervalle $\pm 1.0\%$. Un bruit Gaussien de moyenne nulle et d’écart-type $\sigma = 5.0$ est ajouté à chacune des images de projection.

Le processus de pré-alignement (voir Section 2.2.3) est appliqué sur les images de la série de projection avec décalages simulés. L’objectif est de réduire les forts décalages. À partir de

ces projections pré-alignées, un premier volume reconstruit est obtenu en appliquant une reconstruction régularisée avec une régularisation de type variation totale (voir Section 1.4.2.5). Nous utilisons un modèle numérique de projection (projecteur) de type *B-splines driven* [Momey *et al.* (2011b)], fournissant moins d'erreurs d'approximation que le modèle *distance driven* (voir Section 1.4.2.1).

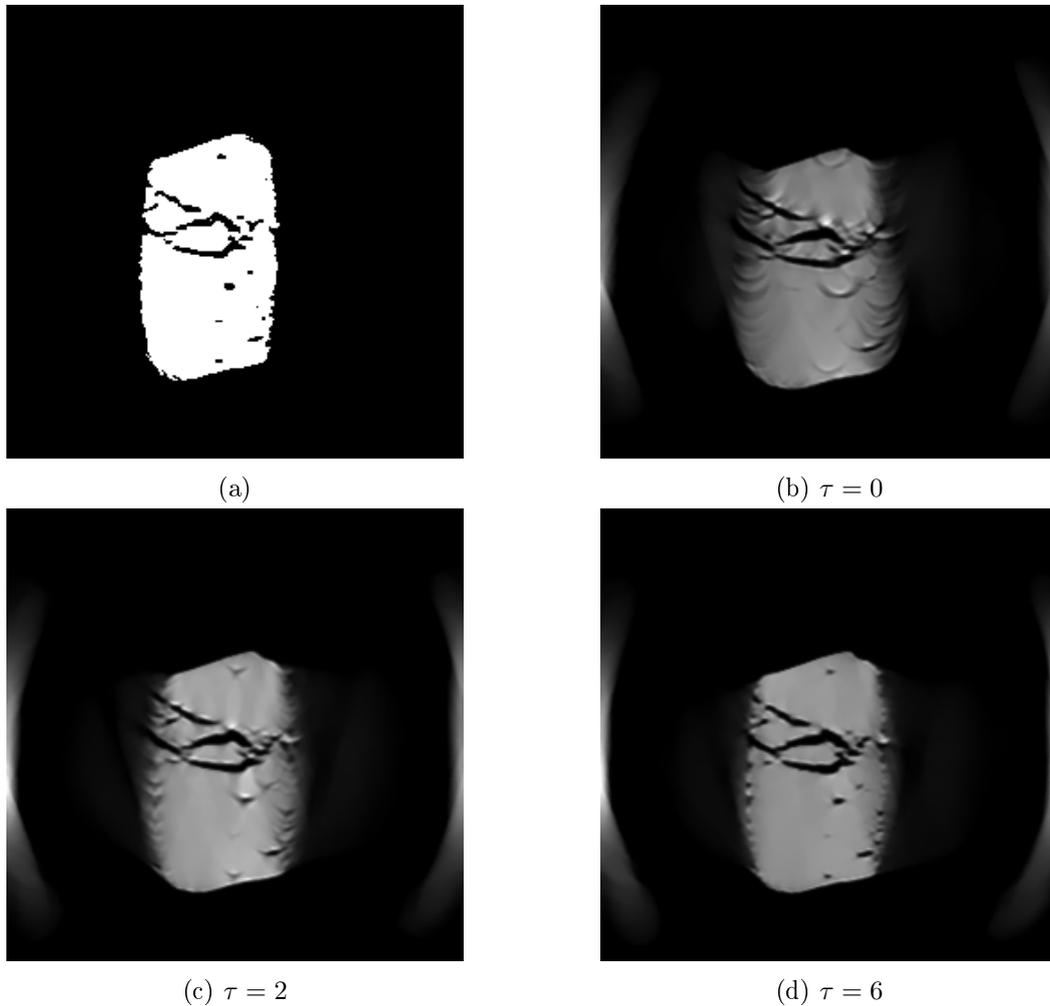


FIGURE 2.19 – (a) Section transversale du fantôme d’origine. (b-d) Sections du volume reconstruit pour différents nombres d’itérations du processus d’alignement raffiné.

La figure 2.19b représente une coupe transversale du volume reconstruit correspondant à la coupe représentée sur la figure 2.19a. La forme de la particule reconstruite est clairement déformée en raison de l’accumulation des erreurs dans le processus de pré-alignement. Ce volume reconstruit est utilisé pour calculer les projections simulées, qui sont ensuite considérées comme les images de référence pour aligner les projections initiales. Ce processus est répété, et la qualité de la reconstruction est améliorée considérablement en quelques itérations. La figure 2.19c représente la section transversale de la reconstruction utilisant deux itérations du processus d’alignement raffiné. 6 itérations sont nécessaires pour obtenir une bonne reconstruc-

tion (voir Fig. 2.19c), presque identique au fantôme d'origine si l'on segmente en 2 phases le volume obtenu, par exemple, seuillage sur histogramme. L'amélioration de la qualité du volume reconstruit à différentes itérations du processus d'alignement est représentée sur la figure 2.20.

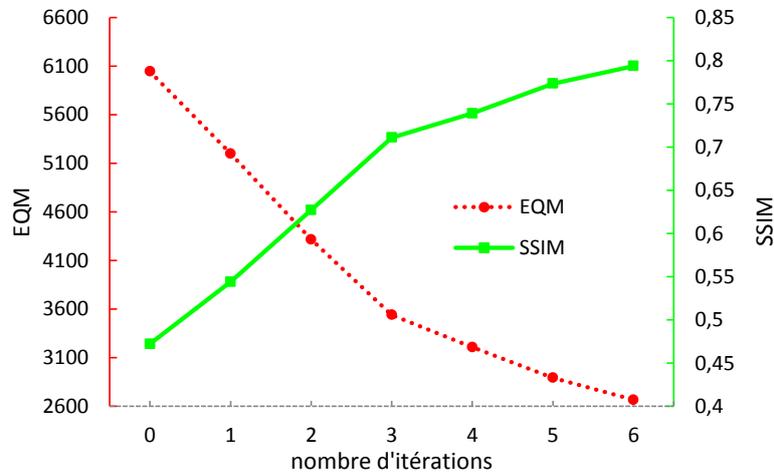


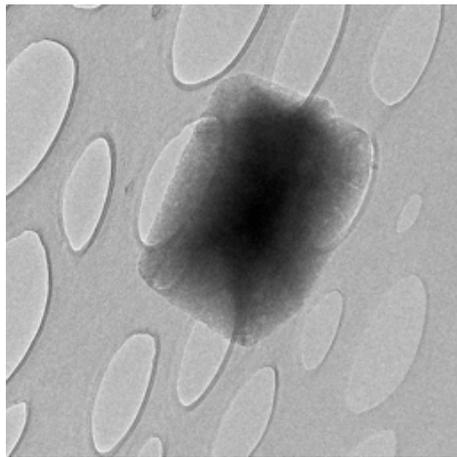
FIGURE 2.20 – Valeurs de l'indice SSIM et EQM entre le fantôme d'origine et le volume reconstruit à différentes itérations.

Dans l'implantation actuelle du code, le temps de calcul pour une reconstruction par optimisation en utilisant L-BFGS (voir 1.4.2.5), est d'environ 3 heures pour un volume de 256^3 voxels. Ce temps peut être réduit considérablement en exécutant l'étape de reconstruction avec une méthode de reconstruction standard comme FBP, SIRT, ART, etc... (voir 1.4). Cependant, ces méthodes ne permettent pas d'ajouter des informations *a priori* pendant la reconstruction, lesquelles sont nécessaires pour réduire les artefacts causés par les projections manquantes (problème de zone aveugle).

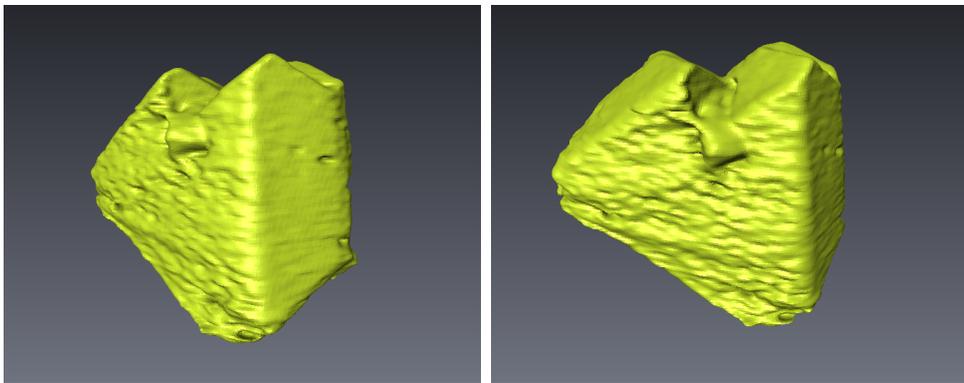
2.5.3.2 Test de notre algorithme avec des données réelles

Un des objectifs de notre travail est une étude approfondie de la porosité des supports de catalyseurs. On s'intéresse par exemple à des poudres de zéolithe (CBV712 de Zeolyst). Sa structure en 3D a pu être visualisée par tomographie électronique. La série de projections nécessaire à la reconstruction tomographique a été acquise par un MET de type JEOL 2100F. La première série de projections contient 142 images, θ variant de -71° à $+70^\circ$. La projection correspondant à $\theta = -71^\circ$ est montrée dans la figure 2.21a. La série d'images a été alignée en utilisant notre approche d'optimisation alternée.

Les figures 2.21b et 2.21c représentent une isosurface de la reconstruction finale, obtenue après 6 itérations du processus d'alignement raffiné. La figure 2.21d illustre une coupe transversale dans la direction xy de la reconstruction finale, montrant que même les petits détails sont reconstruits précisément.



(a)



(b)

(c)



(d)

FIGURE 2.21 – (a) Projection (256×256 , $4,41$ nm/pixel) à $\theta = -71^\circ$. (b-c) Isosurface de la reconstruction finale. (d) Section transversale du volume reconstruit dans la direction xy .

Pour notre second test, nous avons utilisé une autre série de projections d'une poudre de zéolithe, contenant 141 images de projections de -71° à 69° . Les projections à $\theta = -71^\circ, 20^\circ$ sont présentées dans les figures 2.22a, 2.22b. Les figures 2.22c, 2.22d illustrent une isosurface de la reconstruction finale obtenue après 6 itérations de notre processus d'alignement et reconstruction.

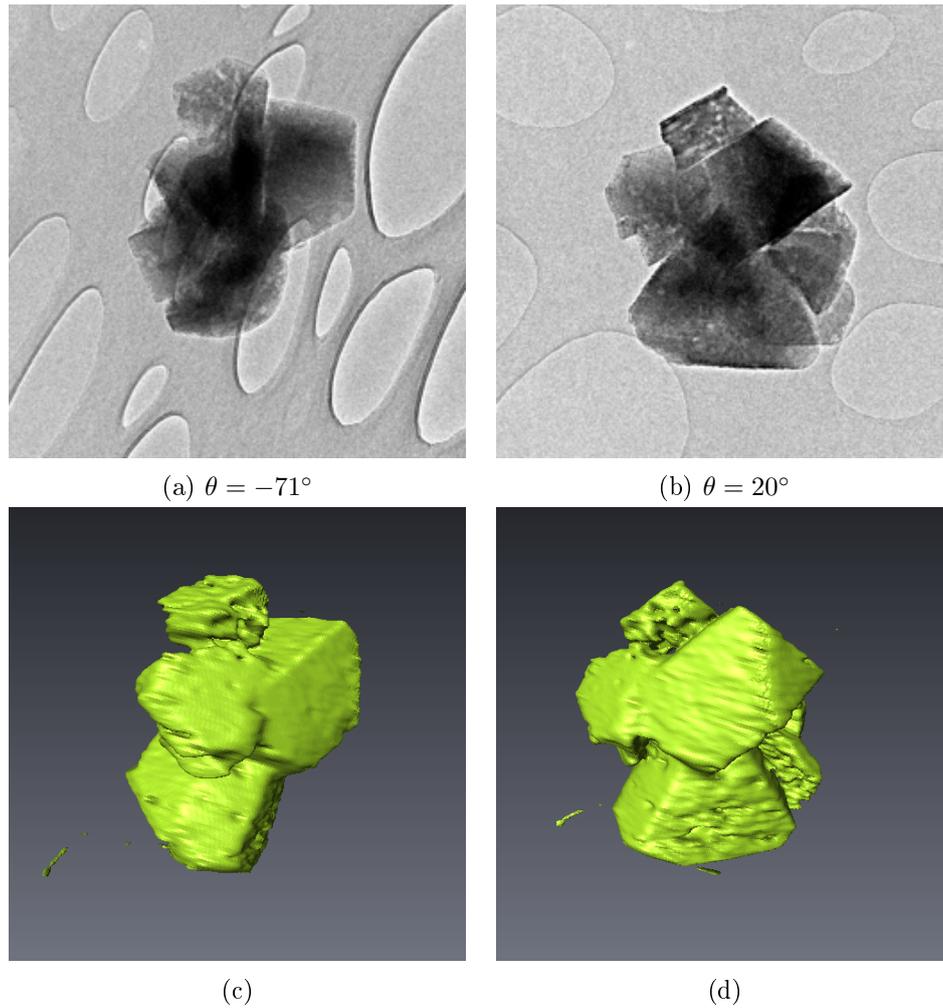


FIGURE 2.22 – (a,b) Projections réelles (256×256 , $4,41$ nm/pixel) selon les angles -71° et 20° respectivement. (c,d) Isosurface du volume final obtenue après 6 itérations de notre méthode d'optimisation alternée.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a commencé par un état de l'art sur les principales techniques d'alignement des images de projections. Les approches d'alignement actuelles emploient habituellement des marqueurs de référence tels que des nanoparticules d'or pour un alignement correct des images. Lorsque les marqueurs ne sont pas utilisés, l'alignement de projections adjacentes peut être obtenu par la corrélation entre ces projections. Cependant, cette méthode n'est pas efficace pour estimer les quatre facteurs de transformation (en termes de translations horizontale et verticale, de rotation et de changement d'échelle).

Afin d'améliorer la qualité d'alignement sans marqueurs, nous avons développé une nouvelle méthode permettant de recalibrer deux images par optimisation et qui peut corriger simultanément ces quatre facteurs de transformation. Cette méthode est plus robuste que les approches fondées sur la recherche du maximum de corrélation. Nous avons détaillé également comment appliquer cette méthode pour aligner une série de projections (recalage de proche en proche).

En pratique, les projections alignées avec l'approche de recalage de proche en proche présentent un défaut d'alignement dû à une accumulation des erreurs. En outre, cette approche ne permet pas de corriger le problème de décalage entre l'axe de tilt et l'axe de rotation du système de reconstruction (*cf.* section 2.5). Ainsi, nous utilisons cette méthode pour pré-recalibrer les projections avec pour but de réduire les forts déplacements entre les projections successives et de faciliter notre méthode d'alignement par *optimisation alternée*.

Dans la méthode par *optimisation alternée*, les projections pré-recalées sont employées pour initialiser un processus itératif et alterné d'alignement et de reconstruction. Ce processus vise à minimiser alternativement une fonction de coût basée sur (i) la reconstruction du volume et celle basée sur (ii) l'alignement d'une projection réelle avec sa version simulée obtenue à partir du volume reconstruit de (i). À la fin de ce processus, nous obtenons une reconstruction correcte du volume avec l'axe de tilt et des projections correctement alignées. Testée sur des données de simulation, notre méthode d'optimisation alternée récupère d'une manière précise les changements des quatre paramètres de transformation. Nous avons testé avec succès également cette méthode pour des projections réelles et pour différents supports de catalyseur.

Notons que la direction de l'axe de tilt de l'objet doit être identifiée précisément et que l'ensemble des images doit subir une rotation en sorte que cet axe soit vertical avant de procéder à la reconstruction tomographique. Nous avons proposé également dans ce chapitre une méthode pratique visant à estimer cet axe.

Enfin, une solution de déconvolution "myope" a été également exploitée pour restaurer les projections floues en raison d'une mauvaise mise au point du MET. Cette restauration est une étape préalable pour améliorer la précision du recalage.

Chapitre 3

Techniques avancées

3.1 Amélioration de l'optimisation alternée

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté notre méthode d'alignement des images de projection qui commence par un processus de pré-recalage de la série d'images. Ensuite, les images pré-alignées sont utilisées pour initialiser l'étape d'optimisation alternée qui raffine progressivement les paramètres de recalage. Afin d'améliorer cette étape d'optimisation alternée, nous proposons un schéma d'optimisation plus robuste dont le principe est de recalculer une projection selon un modèle déduit des autres projections. Cette amélioration conduit au nouvel algorithme suivant :

1. **Initialisation.** Choix des paramètres de positionnement initiaux $\vartheta^{[0]}$ et $\tau = 0$.
2. **Reconstruction partielle puis alignement.** Reconstruire les voxels pour des paramètres $\vartheta_{k'}^{[\tau]}$ donnés, avec $k' \neq k \mid k = 1, \dots, M$:

$$f_k^{[\tau+1]} = \arg \min_f J(f, \vartheta_{k'}^{[\tau]}) \quad (3.1)$$

où $f_k^{[\tau+1]}$ est le volume reconstruit à partir toutes les projections sauf la projection k , et :

$$J(f, \vartheta_{k'}) = \sum_{k' \neq k} J_{k'}(f, \phi_{k'}) + J_{\text{prior}}(f)$$

Puis chercher le paramètre ϕ_k associé à la projection k :

$$\phi_k^{[\tau+1]} = \arg \min_{\phi_k} J_k(f_k^{[\tau+1]}, \phi_k) + c_k(\phi_k) \quad (3.2)$$

Ces opérations se font en parallèle pour les M projections. Ensuite, les résultats sont regroupés :

$$\vartheta^{[\tau+1]} = \left\{ \phi_k^{[\tau+1]} \right\}_{k=1}^M .$$

3. **Test de convergence.** Si la méthode a convergé (par exemple si l'amplitude maximum des paramètres d'alignement de translation est inférieure à 1 pixel pour deux itérations consécutives), arrêter les itérations, sinon incrémenter τ et retourner à l'étape 2.

Le schéma d'optimisation alternée décrit ci-dessus est plus robuste que celui présenté dans le paragraphe 2.3 car il ne *renforce* pas les erreurs de recalage pour la projection k pendant l'alignement de cette projection. En revanche, le temps de calcul de ce nouveau schéma est beaucoup plus important car il nécessite une reconstruction à partir des projections $k' \neq k | k = 1, \dots, M$ pour aligner la projection k . Ainsi, en pratique, pour une série de projections de 142 images, il est nécessaire de reconstruire 142 volumes pour une itération d'alignement, sachant que la reconstruction est l'étape la plus coûteuse en temps de calcul dans le schéma d'optimisation alternée.

Pour toutes ces raisons, l'algorithme présenté ci-dessus est difficilement applicable directement en pratique. Nous allons présenter, dans le paragraphe suivant, une variante de cet algorithme, nommé *optimisation alternée et alignement alterné*, qui non seulement réunit tous les avantages du nouveau schéma d'optimisation alternée mais est aussi plus efficace en temps de calcul.

3.1.1 Optimisation alternée et alignement alterné

Cette méthode traite de façon différente les projections selon leur parité :

- **Groupe impair** contenant les projections $k_{gi} = \{1, 3, 5, \dots, 2n + 1\}$
- **Groupe pair** contenant les projections $k_{gp} = \{2, 4, 6, \dots, 2n\}$

avec $n \in \mathbb{N}$ et $\text{Card}(k_{gi}) + \text{Card}(k_{gp}) = M$.

Ensuite, les projections du groupe impair servent à l'étape de reconstruction et les projections du groupe pair sont utilisées pour l'étape d'alignement et inversement au fur et à mesure des itérations. Ce schéma d'optimisation est décrit par l'algorithme suivant :

1. **Initialisation.** Séparer les projections en deux groupes k_{gi} et k_{gp} . Choisir des paramètres de positionnement initiaux $\vartheta^{[0]} = \{\vartheta_{\text{gi}}^{[0]}, \vartheta_{\text{gp}}^{[0]}\}$ et $\tau = 0$.

2. **Reconstruction partielle puis alignement partiel.**

- Reconstruire les voxels aux paramètres $\vartheta_{\text{gi}}^{[\tau]}$ fixés :

$$f_{\text{gi}}^{[\tau+1]} = \arg \min_f J(f, \vartheta_{\text{gi}}^{[\tau]}) \quad (3.3)$$

- Chercher le paramètre $\phi_{k_{\text{gp}}}$ associé à chaque projection k_{gp} :

$$\phi_{k_{\text{gp}}}^{[\tau+1]} = \arg \min_{\phi_{k_{\text{gp}}}} J_{k_{\text{gp}}}(f_{\text{gi}}^{[\tau+1]}, \phi_{k_{\text{gp}}}) + c(\phi_{k_{\text{gp}}}) \quad (3.4)$$

Cette opération d'alignement peut se réaliser en parallèle pour toutes les projections dans le groupe pair.

- Regrouper les résultats pour les projections paires :

$$\vartheta_{\text{gp}}^{[\tau+1]} = \{\phi_{k_{\text{gp}}}^{[\tau+1]}\}$$

- Reconstruire les voxels aux paramètres $\vartheta_{\text{gp}}^{[\tau+1]}$ retrouvés :

$$f_{\text{gp}}^{[\tau+1]} = \arg \min_f J(f, \vartheta_{\text{gp}}^{[\tau+1]}) \quad (3.5)$$

- Chercher le paramètre $\phi_{k_{\text{gi}}}$ associé à chaque projection k_{gi} :

$$\phi_{k_{\text{gi}}}^{[\tau+1]} = \arg \min_{\phi_{k_{\text{gi}}}} J_{k_{\text{gi}}}(f_{\text{gp}}^{[\tau+1]}, \phi_{k_{\text{gi}}}) + c(\phi_{k_{\text{gi}}}) \quad (3.6)$$

Cette opération d'alignement peut se réaliser en parallèle pour toutes les projections dans le groupe impair.

- Regrouper les résultats pour les projections impaires :

$$\vartheta_{\text{gi}}^{[\tau+1]} = \{\phi_{k_{\text{gi}}}^{[\tau+1]}\}$$

- Regrouper les résultats pour toutes les projections :

$$\vartheta^{[\tau+1]} = \{\vartheta_{\text{gi}}^{[\tau+1]}, \vartheta_{\text{gp}}^{[\tau+1]}\}$$

3. **Test de convergence.** Si la méthode a convergé, arrêter les itérations. Sinon, incrémenter τ et retourner à l'étape 2.

Cet algorithme garantit une convergence vers une solution plus rapide que celui d'*optimisation alternée* (cf. Paragraphe 2.3) car il prend en compte l'avantage de l'algorithme présenté dans la partie 3.1 ne renforçant pas les défauts d'alignement. De plus, en séparant les projections en deux groupes et en utilisant un seul groupe à chaque fois pour l'étape de reconstruction et l'étape d'alignement, le temps de calcul est considérablement réduit. Cette propriété est vraiment intéressante lorsque nous travaillons avec des projections à haute résolution¹.

Afin de garantir la cohérence entre les paramètres ϑ_{gi} et ϑ_{gp} dans le résultat final ϑ^+ (ensemble des paramètres d'alignement étant retrouvés), il est nécessaire d'effectuer quelques itérations supplémentaires du processus d'*optimisation alternée* sur toutes les projections, en choisissant ϑ^+ comme paramètres initiaux.

Pour résumer, nous illustrons dans la figure 3.1 le schéma d'*optimisation alternée* et dans la figure 3.2 celui d'*optimisation alternée et alignement alterné*.

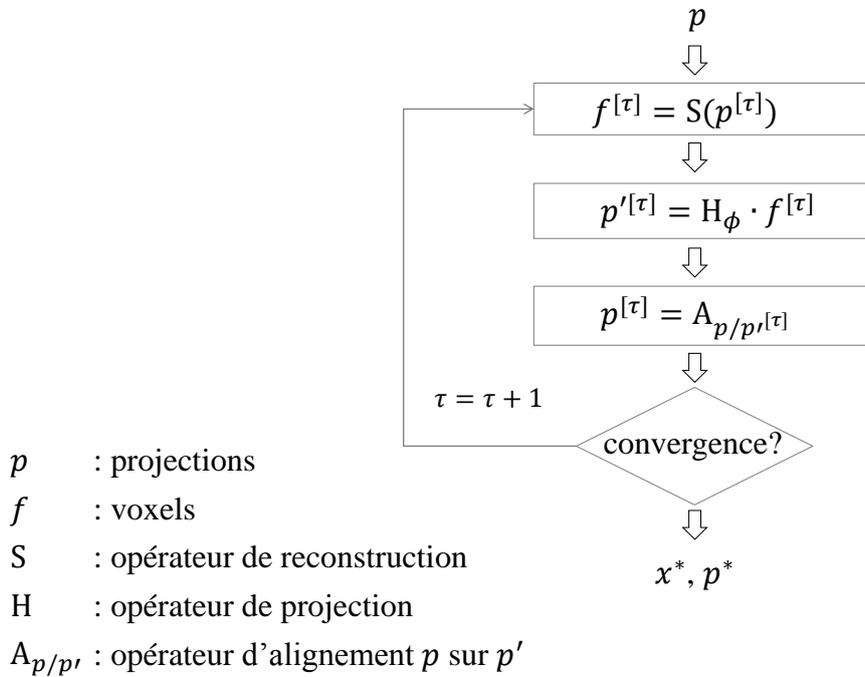


FIGURE 3.1 – Représentation schématique des différentes étapes du schéma d'*optimisation alternée*.

1. Un MET actuel peut fournir des projections avec la résolution de 2048×2048 pixel.

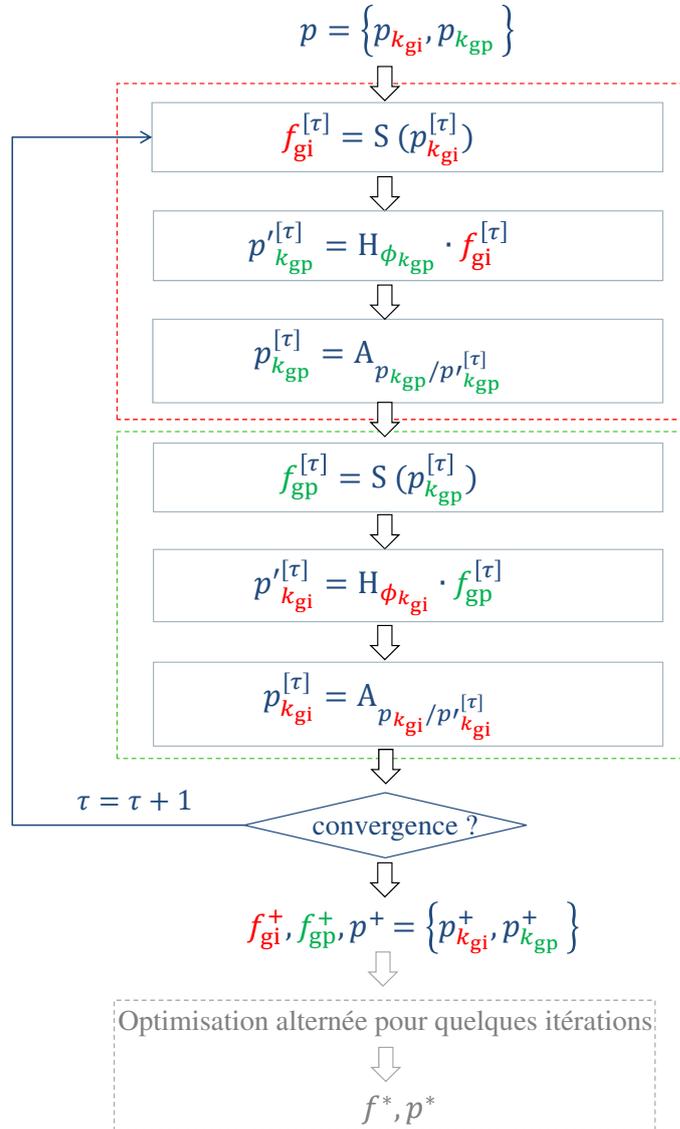


FIGURE 3.2 – Représentation schématique des différentes étapes du schéma d'*optimisation alternée et alignement alterné*.

3.1.2 Validation

3.1.2.1 Test avec des données de simulation

Pour valider l'efficacité de notre nouveau schéma d'optimisation, nous prenons la même série de projections simulées ayant été utilisée dans la section 2.5.3.1. La figure 3.3 illustre une section transversale de l'objet utilisé pour générer des projections. Cette série contient 142 projections simulées (256×256 pixels), calculées de -71° à $+70^\circ$ par pas angulaires de $+1^\circ$. Chacune des images de la série est aléatoirement transformée par des décalages horizontaux et verticaux inférieurs à $\pm 30\%$ de la dimension de l'image, par des légères rotations (ne dépassant pas $\pm 0.5^\circ$) et par de petits changements de grandissement dans l'intervalle $\pm 1.0\%$. Un bruit gaussien de moyenne nulle et d'écart-type $\sigma = 5.0$ est également ajouté à chaque image.

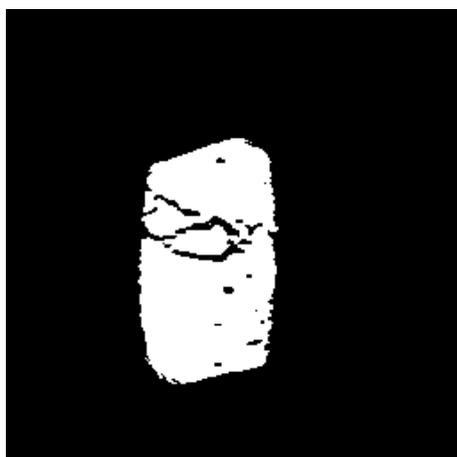
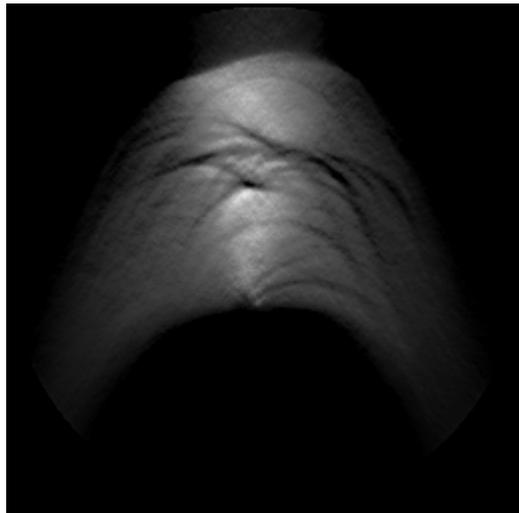


FIGURE 3.3 – Section transversale du fantôme d'origine, orthogonale à l'axe d'inclinaison.

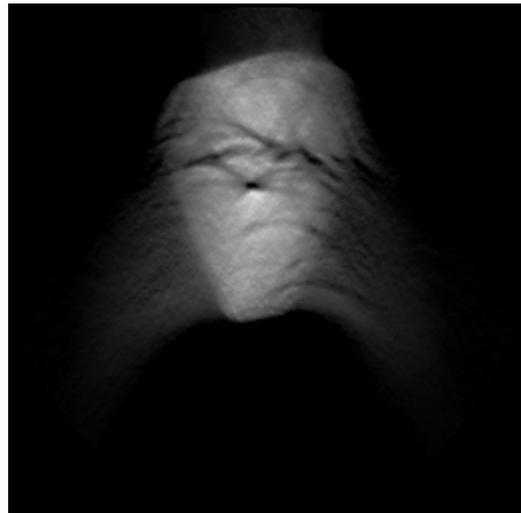
Notons que nous avons l'information exacte sur les paramètres de transformation qui ont été appliqués sur chaque image de projections pour créer les projections avec des décalages simulés. Ainsi, nous connaissons également les paramètres appliqués sur l'image, qui sera choisie en tant qu'image de référence dans l'étape de pré-alignement. En outre, le décalage horizontal de cette image de référence est équivalent à celui entre l'axe d'inclinaison et l'axe de rotation du système de reconstruction (voir paragraphe 2.1.3). Afin de renforcer ce décalage pour tester la robustesse de nos schémas d'optimisation, nous ajoutons une translation horizontale à cette image de référence pour que l'axe de tilt soit décalé d'environ 55 pixels par rapport à l'axe de reconstruction. Notons qu'avec un tel décalage, l'objet reconstruit doit être totalement déformé (voir page 51).

Nous appliquons maintenant notre méthode de pré-alignement à la série de projections avec des décalages simulés pour réduire les forts décalages entre les projections successives. Ensuite, nos deux algorithmes d'*optimisation alternée* et d'*optimisation alternée et alignement alterné* sont utilisés pour aligner finement les images. Afin de diminuer le temps de calcul, nous utilisons la méthode de type SIRT (voir 1.4.2.3) pour l'étape de reconstruction.

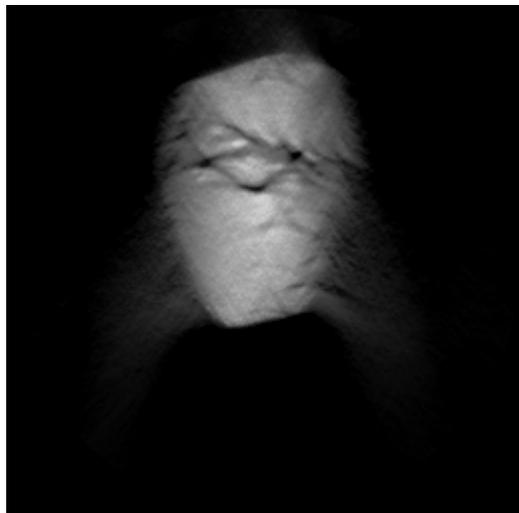
Les figures 3.4 et 3.5 représentent une coupe dans le plan yz du volume reconstruit pour différents nombres d'itérations d'*optimisation alternée* et d'*optimisation alternée et alignement alterné* respectivement. Les figures 3.4a et 3.5a illustrent la morphologie de la particule reconstruite à $\tau = 0$, totalement déformée à cause des artéfacts issus du fort décalage entre l'axe de tilt et l'axe de reconstruction. La qualité de la reconstruction est améliorée au cours des itérations. Nous constatons que notre nouveau schéma d'optimisation converge beaucoup plus vite que l'*optimisation alternée*. Le schéma d'*optimisation alternée et alignement alterné* nécessite seulement 2 itérations pour donner un résultat correct (*cf.* Fig. 3.5f), correspondant approximativement à celui obtenu après 6 itérations d'*optimisation alternée* (*cf.* Fig. 3.4f).



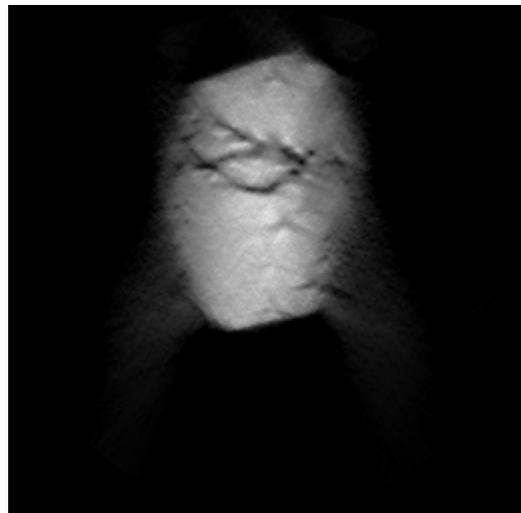
(a) $\tau = 0$



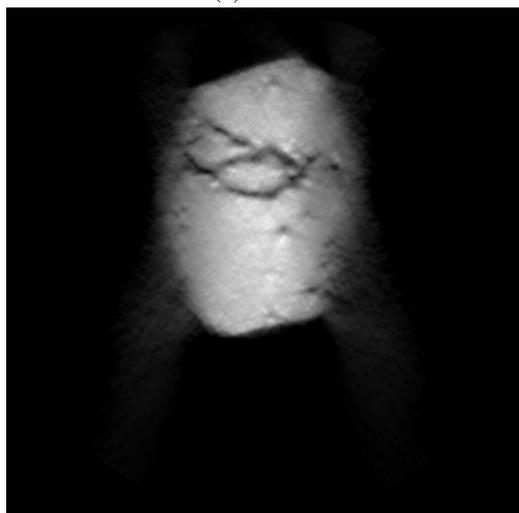
(b) $\tau = 1$



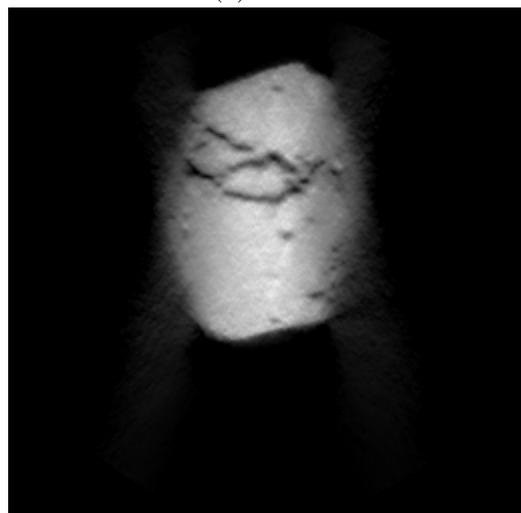
(c) $\tau = 2$



(d) $\tau = 3$

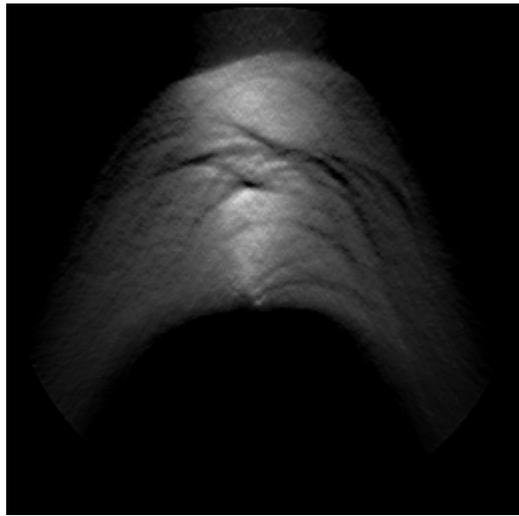


(e) $\tau = 4$

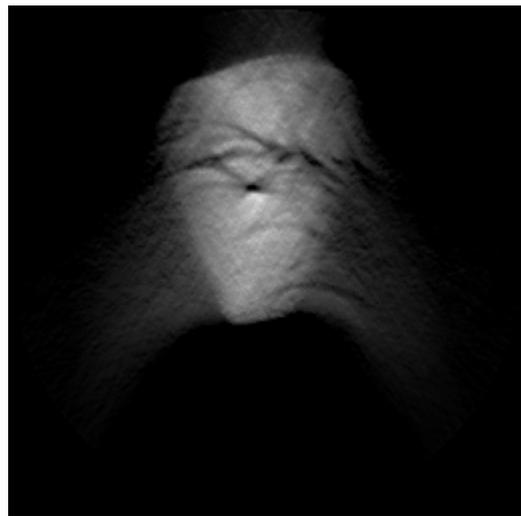


(f) $\tau = 6$

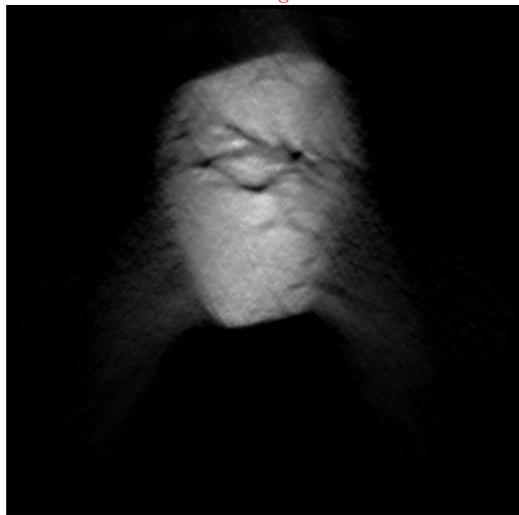
FIGURE 3.4 – Évolution d'une coupe dans le plan yz du volume reconstruit pour différentes valeurs du nombre d'itérations d'*optimisation alternée*.



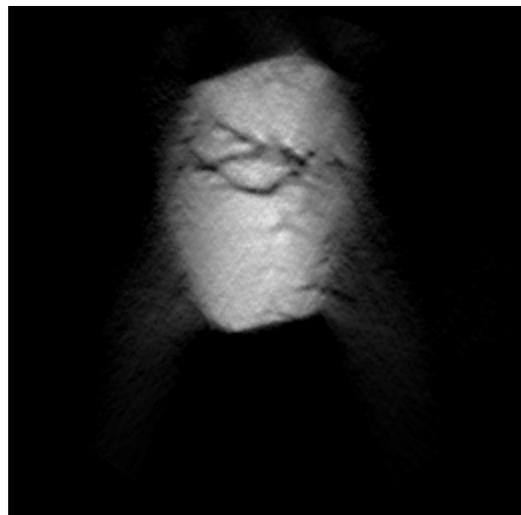
(a) $f_{gi}^{[0]}$



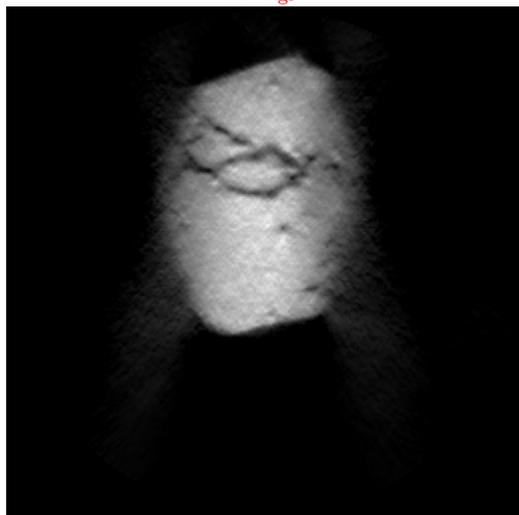
(b) $f_{gp}^{[0]}$



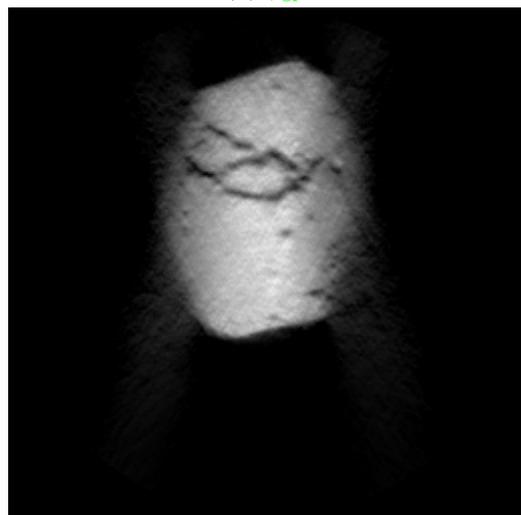
(c) $f_{gi}^{[1]}$



(d) $f_{gp}^{[1]}$



(e) $f_{gi}^{[2]}$



(f) $f_{gp}^{[2]}$

FIGURE 3.5 – Évolution d'une coupe dans le plan yz du volume reconstruit pour différentes valeurs du nombre d'itérations d'*optimisation alternée et alignement alterné*.

La figure 3.6 représente les valeurs de l'indice d'EQM entre le fantôme d'origine et le volume reconstruit pour différentes itérations des deux schémas d'optimisation : les symboles (●) représentant la variation du facteur d'EQM entre le fantôme d'origine et le volume reconstruit par l'*optimisation alternée* et les symboles (■) représentant l'indice d'EQM entre le fantôme d'origine et le volume reconstruit à partir des projections impaires ($f_{gi}^{[\tau]}$) dans le processus d'*optimisation alternée et alignement alterné*.

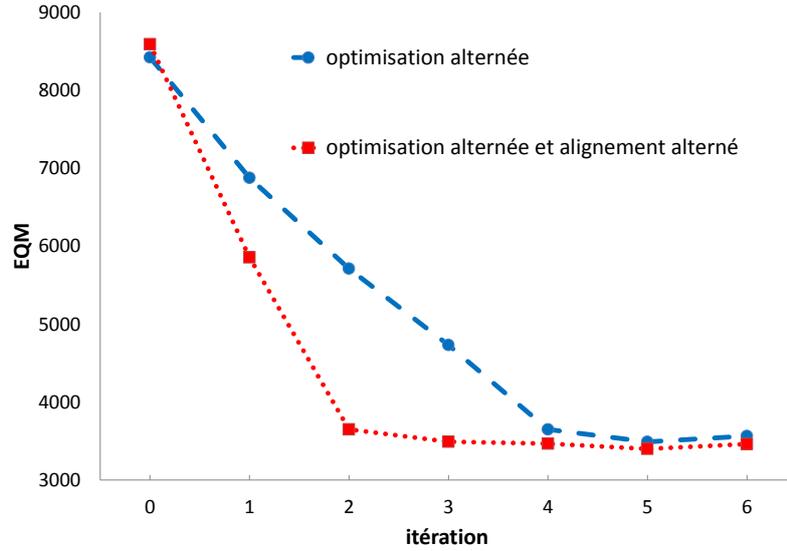
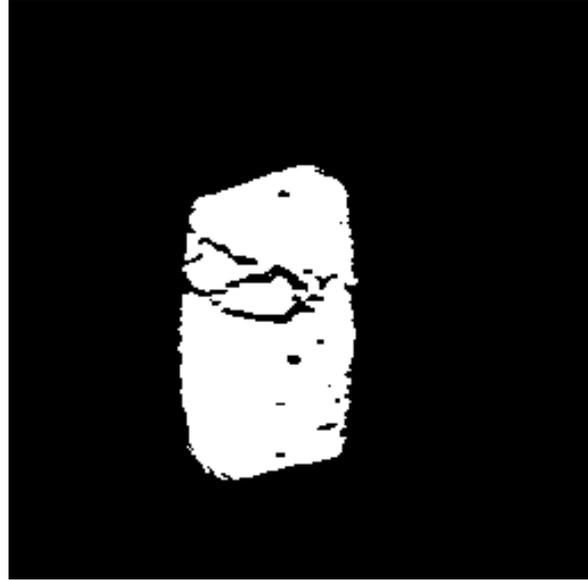
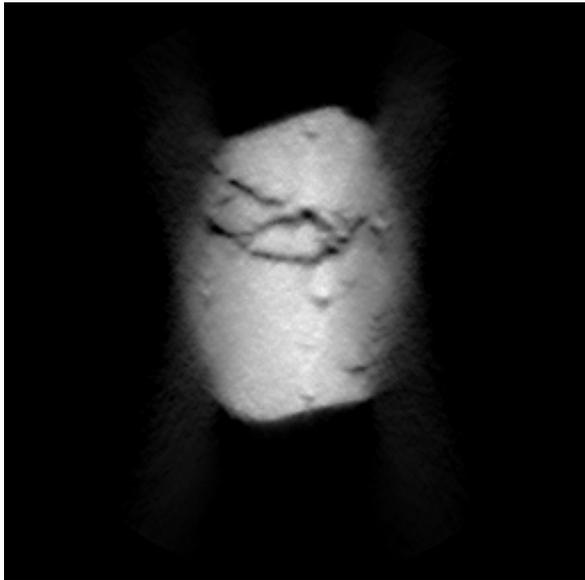


FIGURE 3.6 – Valeurs de l'indice d'EQM entre le fantôme d'origine et le volume reconstruit aux différentes itérations.

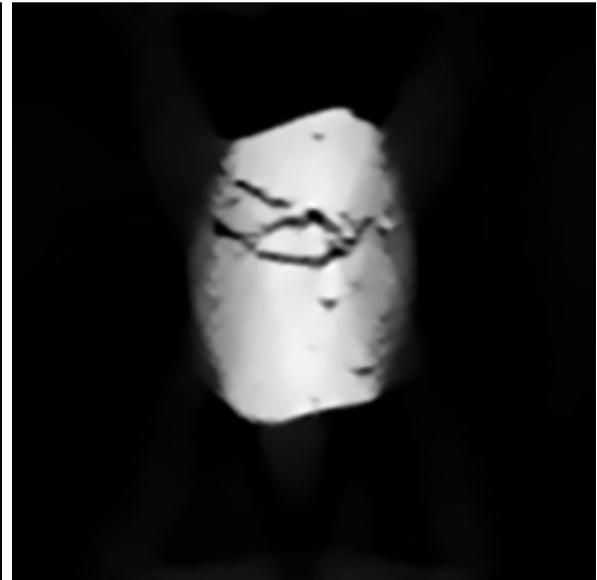
Afin de corriger le problème des projections manquantes (voir 1.3.2), nous effectuons une dernière reconstruction sur les projections alignées finales, en utilisant une méthode de reconstruction régularisée (approche inverse avec régularisation). La figure 3.7c représente la coupe reconstruite par la méthode inverse avec régularisation de type TV (voir 1.4.2.5). L'objet est mieux reconstruit, c'est-à-dire présente moins de bruit et d'artefacts, les petits détails sont nets, en comparaison de celui reconstruit par SIRT (*cf.* Fig. 3.7b).



(a)



(b) SIRT



(c) approche inverse + régularisation TV

FIGURE 3.7 – Comparaison entre le volume reconstruit par SIRT et celui de la reconstruction régularisée. (a) Section transversale du fantôme d'origine. (b,c) Coupe correspondante dans le volume reconstruit avec SIRT et approche inverse avec régularisation de type TV respectivement.

Nous avons répété le processus de test présenté ci-dessus sur 10 jeux différents de paramètres de transformation. Pour chaque jeu de données, le décalage de l'axe de tilt est toujours choisi important (variant entre 40 à 55 pixels). La figure 3.8 illustre la variation du facteur d'EQM moyenne, notée $\overline{\text{EQM}}$, entre le fantôme d'origine et les volumes reconstruits aux différentes itérations de deux schémas d'optimisation. Les intervalles de confiance $\left[\overline{\text{EQM}} - 1,96 \frac{\sigma(\text{EQM})}{\sqrt{10}}, \overline{\text{EQM}} + 1,96 \frac{\sigma(\text{EQM})}{\sqrt{10}} \right]$ sont également montrés.

Où $\sigma(\text{EQM}) = \sqrt{\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} (\text{EQM}_i - \overline{\text{EQM}})^2}$.

Nous concluons que notre schéma d'*optimisation alternée et alignement alterné* converge beaucoup plus vite que celui de l'*optimisation alternée*.

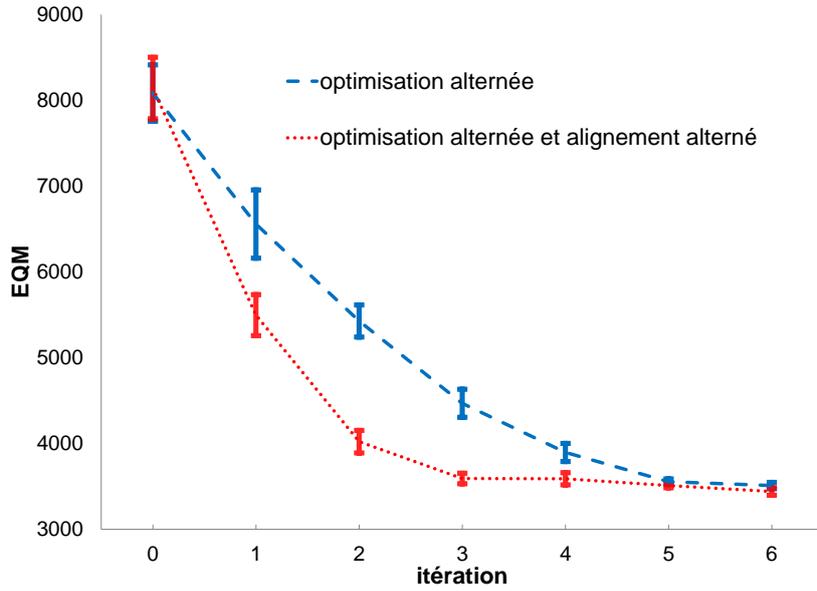


FIGURE 3.8 – Valeurs de l'indice d'EQM moyenne entre le fantôme d'origine et les volumes reconstruits aux différentes itérations.

3.1.2.2 Tests avec des données réelles

Nous passons maintenant à la mise en application et à l'évaluation des performances de nos schémas d'optimisation dans le cadre d'une reconstruction 3D à partir de données réelles. La série de projections nécessaire à la reconstruction tomographique a été acquise à IFPEEn par un MET de type JEOL 2100F. L'objet imagé présente des "fibrilles autoclavées" 1205348-003. La figure 3.9 illustre la première projection de la série (143 projections, $\theta \in [-71^\circ, 71^\circ]$). Les projections correspondant à $\theta = -18^\circ$ et -19° sont représentées dans la figure 1.14.

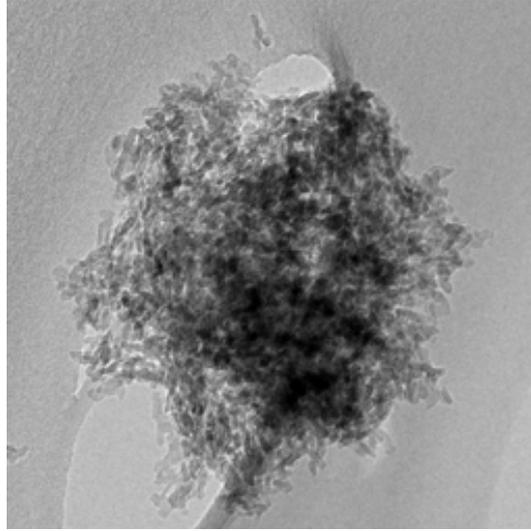
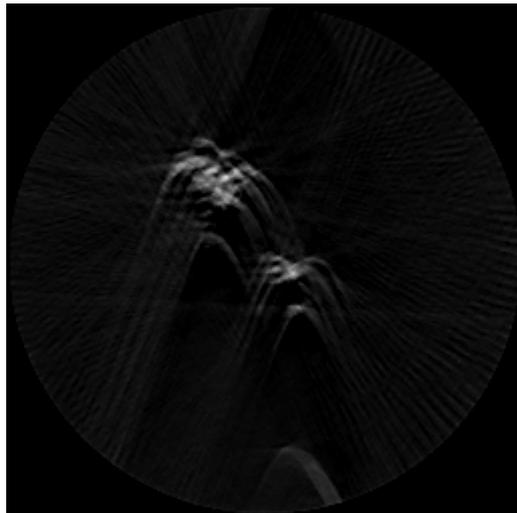
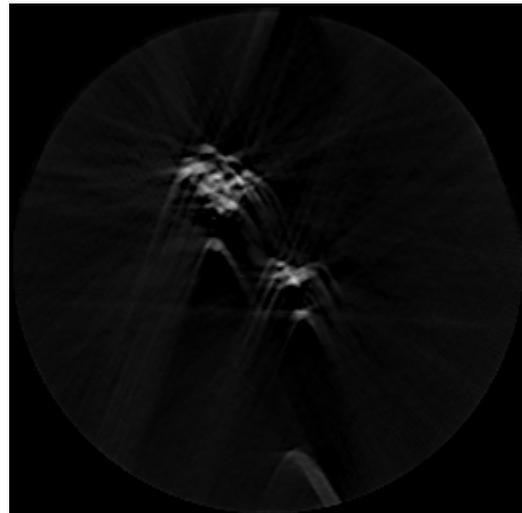


FIGURE 3.9 – Première projection de la série (512×512 , $0,66$ nm/pixel, $\theta = 71^\circ$).

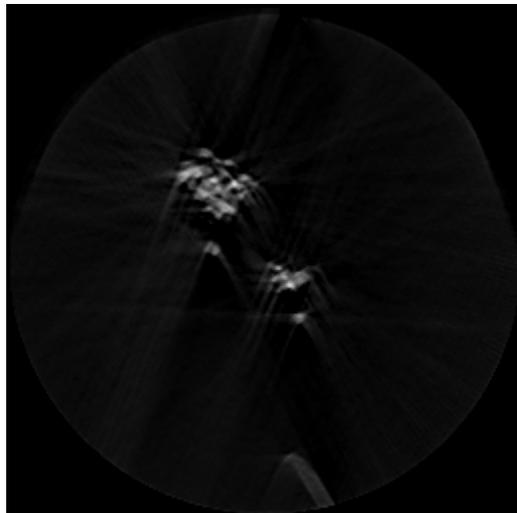
Après avoir été pré-alignées, les projections sont ensuite utilisées pour initialiser nos deux schémas d'optimisation. Nous montrons dans la figure 3.10 une coupe dans la direction yz du volume reconstruit à différentes itérations de notre ancien processus d'optimisation. Nous constatons qu'une bonne reconstruction (projections bien alignées) est obtenue après environ 14 itérations (*cf.* Fig. 3.10f). Ce résultat peut être obtenu en seulement 6 itérations avec notre nouveau processus d'optimisation (illustration par l'image 3.11d). L'évolution des volumes reconstruits avec notre nouveau schéma d'optimisation est illustrée dans la figure 3.11 (ces volumes sont estimés à partir du groupe de projections impaire ou paire). La coupe correspondant au volume final estimé sur toutes les projections (impaire+paire) est représenté dans la figure 3.11e. Nous montrons dans les figures 3.12a, 3.12b un rendu volumique et une coupe dans le plan xy de ce dernier volume respectivement.



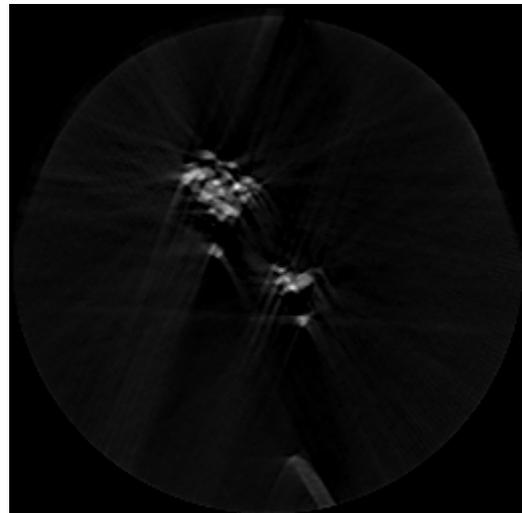
(a) $\tau = 0$



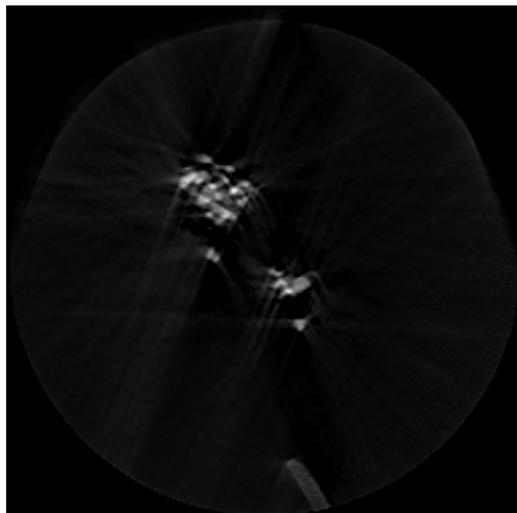
(b) $\tau = 5$



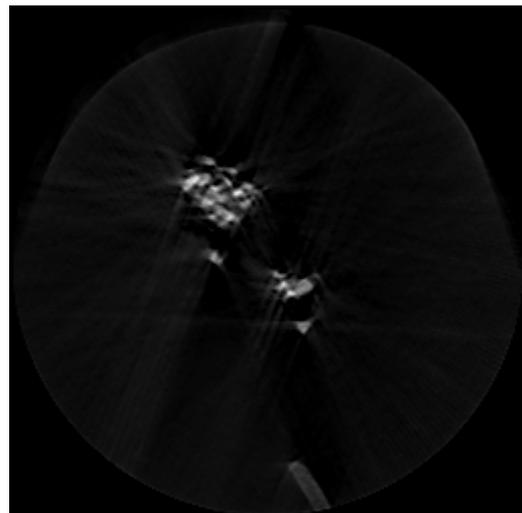
(c) $\tau = 8$



(d) $\tau = 10$

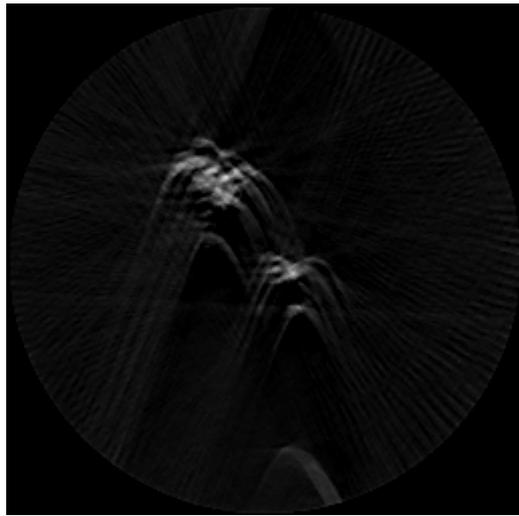


(e) $\tau = 12$

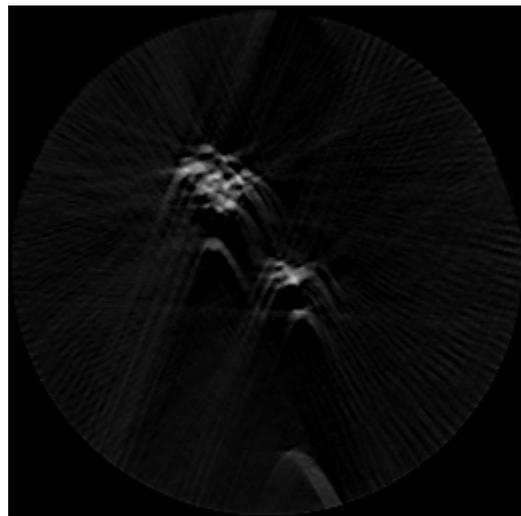


(f) $\tau = 14$

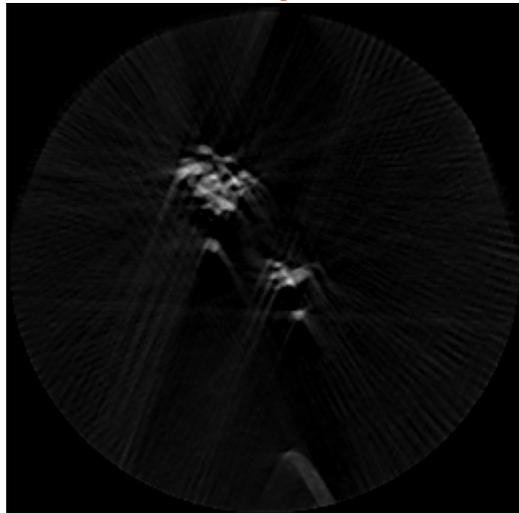
FIGURE 3.10 – Évolution d'une coupe dans le plan yz du volume reconstruit en utilisant différents nombres d'itérations d'*optimisation alternée*.



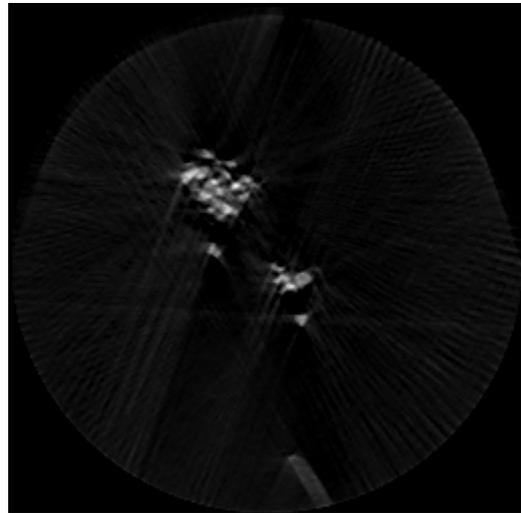
(a) $f_{\text{gi}}^{[0]}$



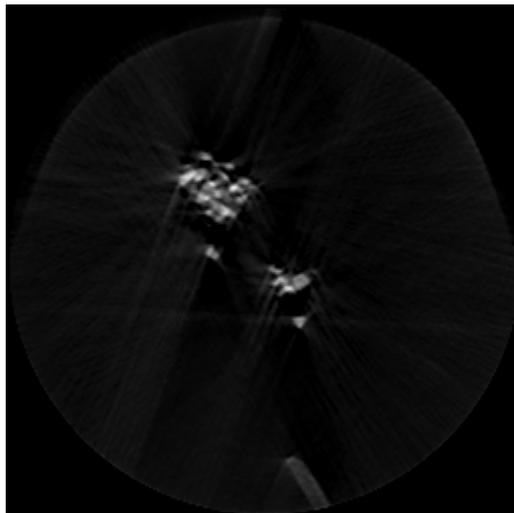
(b) $f_{\text{gp}}^{[1]}$



(c) $f_{\text{gi}}^{[4]}$

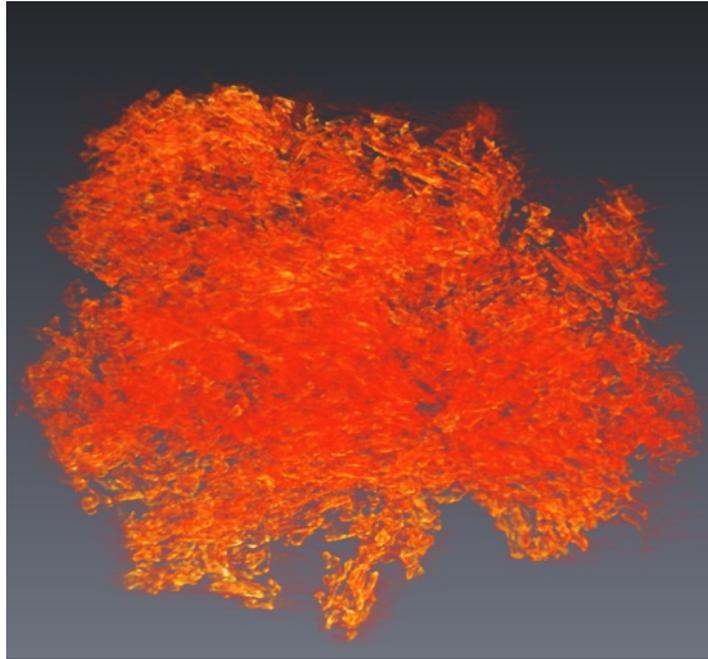


(d) $f_{\text{gi}}^{[6]}$

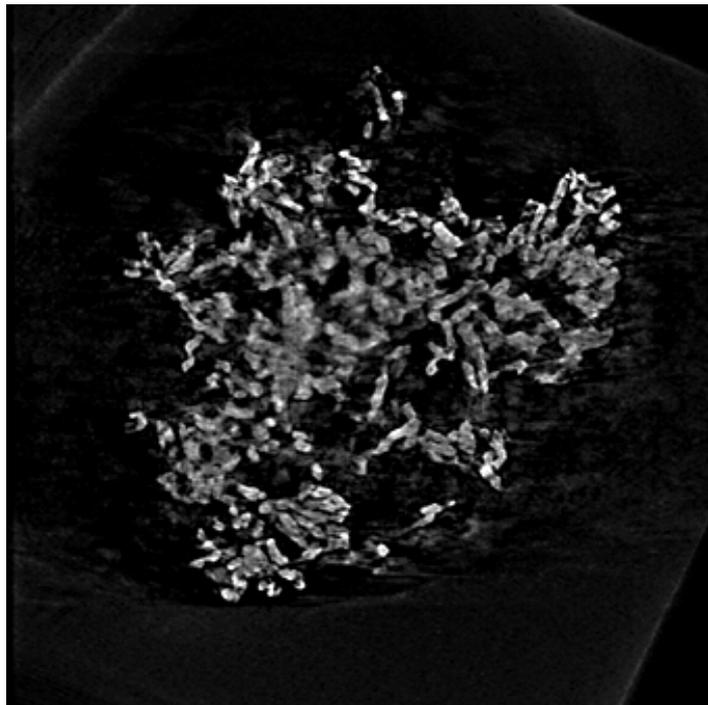


(e) $f_{\text{gi+gp}}^*$

FIGURE 3.11 – Évolution d'une coupe dans le plan yz du volume reconstruit à partir du groupe de projections *impair*/*pair*, en utilisant différents nombres d'itérations d'*optimisation alternée et alignement alterné*.



(a) Rendu volumique



(b) Coupe dans le plan xy (512×512 , 0,66 nm/pixel)

FIGURE 3.12 – Illustration du volume final obtenu par *optimisation alternée et alignement alterné*.

3.2 Prise en compte des franges de Fresnel dans la reconstruction

Dans ce paragraphe, nous décrivons une méthode que nous avons développée pour prendre en compte des franges de Fresnel présentes sur les images de projections et qui dégradent la qualité du volume reconstruit. Elles bordent tout objet observé en MET, et sont le résultat d'interférences entre les faisceaux d'électrons traversant juste le bord d'un échantillon et les faisceaux passant dans le vide à proximité immédiate de ce bord d'échantillon. Ces interférences sont directement liées à la cohérence spatiale du faisceau incident (et sont fortement présentes avec un canon FEG de forte cohérence).

La figure 3.13 illustre une projection où des franges sont présentes : ce sont les pixels localement plus clairs ou plus sombres présents sur les bords et dans la porosité de l'objet. Ces pixels ne correspondent pas à une information d'absorption.

La "couleur" (plus claire ou plus sombre) et l'extension des franges de Fresnel est aisément pilotée par une simple défocalisation de la lentille objectif (sous-focalisation = la distance focale augmente et le plan focal objet de l'objectif passe au-dessus de l'objet et les franges de Fresnel deviennent plus claires à proximité immédiate de l'objet ; sur-focalisation = la distance focale diminue et le plan focal objet de l'objectif passe au-dessous de l'objet et les franges deviennent plus sombres à proximité immédiate de l'objet). Ces franges s'annulent si l'objet est parfaitement dans le plan focal objet de l'objectif.

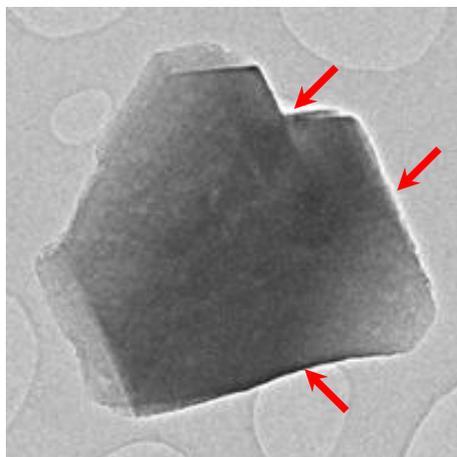


FIGURE 3.13 – Illustration des franges de Fresnel sur une image de projection (256×256 , $4,41$ nm/pixel).

3.2.1 Méthode

Les supports de catalyseurs, comme beaucoup de matériaux observés par tomographie et dont on cherche à caractériser la porosité interne, peuvent être considérés approximativement

comme des objets relativement réguliers et ne présentant pas de structures fines visibles sur les projections. Concernant les franges de Fresnel, nous pouvons noter que celles-ci correspondent d'un point de vue morphologique à des amas de pixels localement plus sombres ou plus clairs. Les opérateurs de morphologie mathématiques (*cf.* Annexe B) sont des opérateurs non linéaires pouvant être utilisés pour transformer une image tout en conservant les structures présentes dans celle-ci. En particulier, il est possible de détecter avec ces opérateurs les structures localement claires et avec une taille maximale d en prenant le résidu de l'image avec l'ouverture morphologique de celle-ci par un disque de diamètre d . Cette opération est appelée "transformation Top Hat" [Meyer (1979)], [Serra (1982)]. Il est également possible de détecter les éléments localement plus foncés en prenant le résidu d'une fermeture morphologique avec l'image initiale. Ces opérations produisent des résultats pour lesquels la morphologie de l'élément structurant n'est pas indifférente. Il est possible de récupérer précisément les structures locales de l'image initiale en utilisant des opérateurs morphologiques géodésiques et en remplaçant l'ouverture morphologique par une ouverture morphologique par reconstruction [Vincent (1993)].

Notre approche est basée sur l'ouverture morphologique par reconstruction, qui nous permet de créer une carte a_k liée (de façon monotone) à la probabilité de présence des artefacts. Nous proposons de construire cette carte directement d'après les projections d'après les deux étapes suivantes :

1. Détermination de la carte de présence des franges claires a_k^l et sombres a_k^d pour chacune des projections p_k :

$$a_k^l = [p_k - \gamma_{rec}^{p_k}(\varepsilon_D(p_k))] * G_\sigma \quad (3.7)$$

$$a_k^d = [\text{Inv}(p_k) - \gamma_{rec}^{\text{Inv}(p_k)}(\varepsilon_D(\text{Inv}(p_k)))] * G_\sigma \quad (3.8)$$

avec $\gamma_{rec}^{p_k}()$ opérateur de reconstruction morphologique (voir Annexe B pour plus de détails), $\varepsilon_D()$ opérateur d'érosion par un disque D de diamètre d ; $[*]$ opérateur de convolution; $\text{Inv}()$ opérateur d'inversion²; G_σ noyau gaussien d'écart-type σ .

2. Création de la carte a_k comme une combinaison linéaire normalisée des deux cartes ci-dessus :

$$a_k = \frac{a_k^l + a_k^d - \min[a_k^l + a_k^d]}{\max[a_k^l + a_k^d] - \min[a_k^l + a_k^d]} \quad (3.9)$$

Par construction, $a_k^i \in [0, 1]$ quelque soit le pixel i . Si a_k^i vaut 0 (zéro), nous supposons qu'il n'y a pas d'artefact; au contraire, plus a_k^i se rapproche de 1, plus il est probable d'avoir des artefacts à cet endroit. Par abus de langage, nous appelons a_k "carte de probabilité" de présence des artefacts. La figure 3.14 représente une telle carte pour la projection présentée dans l'image 3.13.

2. $\text{Inv}(p_k) = 255 - p_k$ pour une image 8 bits

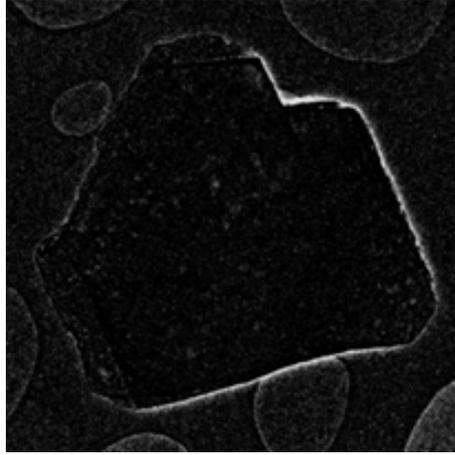


FIGURE 3.14 – Illustration d’une carte de probabilité de présence des franges de Fresnel (256×256 , $4,41$ nm/pixel).

Une fois que la carte de probabilité a été construite, nous voulons l’intégrer dans le processus de reconstruction tomographique. En réalisant que le modèle linéaire $H_{\phi_k} \cdot f$ d’une projection p_k ne prend pas en compte les franges de Fresnel, il faut réécrire le modèle direct comme :

$$p_k = H_{\phi_k} \cdot f + b_k + e_k \quad (3.10)$$

où e_k est la contribution du bruit et b_k est un terme de biais qui prend en compte des franges de Fresnel. La façon la plus simple de prendre en compte ces franges dans une méthode de reconstruction basée sur ce modèle linéaire est donc d’appliquer la méthode aux projections débiaisées $p_k - b_k$ au lieu de p_k . L’objet reconstruit s’écrit :

$$f^+ = \mathcal{S}(p - b) \quad (3.11)$$

où \mathcal{S} est l’opérateur de reconstruction et $p - b$ l’ensemble des projections débiaisées.

Il reste à déterminer le biais b . Pour cela, nous supposons que, pour chaque pixel i , le biais des franges de Fresnel b_k^i est une fonction monotone de a_k^i . Pour un biais faible, un développement limité conduit à prendre $b_k^i = \eta a_k^i$ avec $\eta > 0$. Pour les méthodes de reconstruction conventionnelles comme FBP, ART, SIRT, etc..., ou même approche inverse quadratique dont le résultat est une fonction linéaire des mesures, nos hypothèses nous conduisent à écrire l’objet reconstruit comme :

$$f^+ = \mathcal{S}(p - \eta a) = \mathcal{S}(p) - \eta \mathcal{S}(a). \quad (3.12)$$

Dans notre approche, les artefacts des franges de Fresnel sont donc très faciles à corriger (il suffit de régler η). Qualitativement, remplacer les projections p_k par $p_k - \eta a_k$ revient à donner moins d’importance aux mesures les plus susceptibles d’être entachées d’artefacts des franges de Fresnel. L’application de notre méthode sur des données empiriques est décrite dans la section 3.2.2.

Plus rigoureusement, comme le biais est estimé d'après les mesures, il faudrait prendre en compte son impact sur la covariance des mesures débiaisées. Dans le cadre d'une approche inverse basée sur une optimisation globale (voir Section 1.4.2.5), cela nous conduirait à rechercher l'objet reconstruit comme :

$$\begin{aligned} f^+ &= \arg \min_f \{J_{\text{data}}(f) + \lambda J_{\text{prior}}(f)\} \\ &= \arg \min_f \left\{ \sum_{k=1}^M \|p_k - \eta a_k - H_{\phi_k} \cdot f\|_{W_k}^2 + \lambda J_{\text{prior}}(f) \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

avec $W_k = \text{Cov}(\iota_k | f)^{-1}$ où les résidus ι_k sont donnés par :

$$\iota_k = p_k - \eta a_k - H_{\phi_k} \cdot f.$$

D'après nos hypothèses, les résidus ι_k sont supposés centrés. Par rapport à une approche dans laquelle la diffraction est négligée, il suffit (i) de débiaiser les données — en remplaçant p_k par $p_k - \eta a_k$ — et (ii) de redéfinir les poids statistiques — en remplaçant $\text{Cov}(e_k | f)$ par $\text{Cov}(\iota_k | f)$.

Cette méthode, faisant intervenir une reconstruction séparée des franges de Fresnel, n'est possible qu'à condition que les franges soient présentes sur toutes les projections pour pouvoir en réaliser une reconstruction correcte. C'est le cas lorsque les franges sont dues à des canaux cylindriques de petits diamètres, de la taille des franges, et ce qui rend cette méthode applicable et intéressante pour la reconstruction de supports de catalyseurs.

3.2.2 Validation

Nous présentons maintenant un exemple de reconstruction tenant compte des franges de Fresnel. Les volumes ont été reconstruits à partir d'une série de projections contenant 142 projections (256×256 , 4,41 mn/pixel) d'un zéolithe. Ces projections sont bien alignées par notre algorithme d'alignement. Les images du haut de la figure 3.15 représentent trois différentes coupes du volume reconstruit avec la méthode SIRT conventionnelle. Les images du bas de la figure 3.15 illustrent les coupes correspondant au volume reconstruit avec SIRT et une carte de probabilité de présence des franges de Fresnel. Ces dernières images montrent une amélioration considérable de la qualité de reconstruction (les réseaux poreux apparaissent plus nettement).

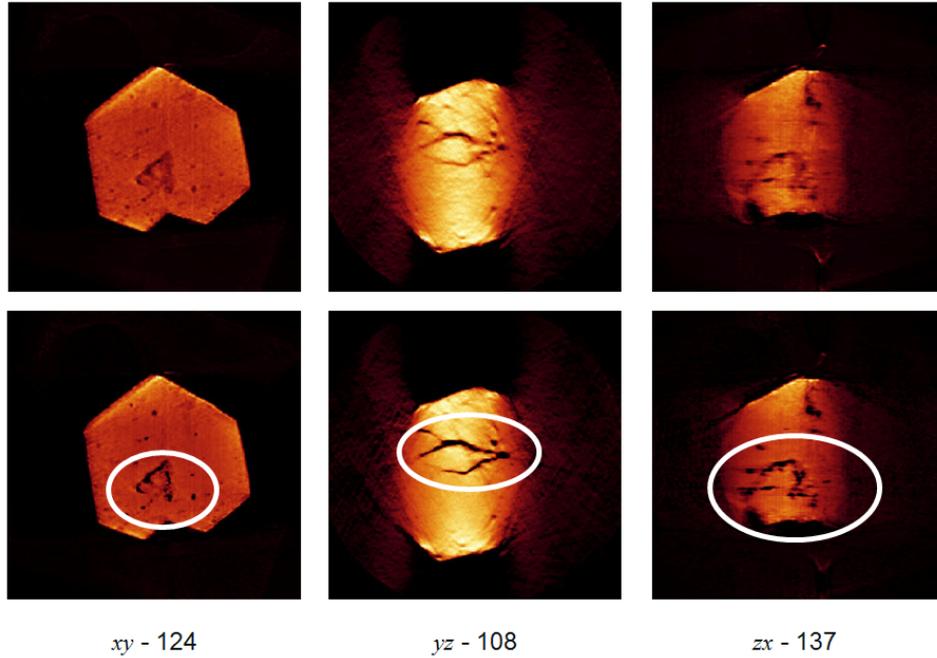


FIGURE 3.15 – Illustration de la reconstruction SIRT prenant en compte la carte de probabilité de présence des franges de Fresnel. Les coupes de reconstruction avec SIRT conventionnelle (en haut), SIRT et carte de probabilité de présence des franges de Fresnel (en bas).

3.3 Méthode dégradée et implantation orientée GPU

3.3.1 Opérateurs de projection et rétro-projection simplifiés

Dans la section 1.4.2.1, nous présentons les différents modèles de projections habituellement utilisés pour la reconstruction tomographique. En pratique, l'implantation de ces modèles est complexe et demande beaucoup de travail. Nous présentons maintenant un opérateur de projection simplifié, qui est une approximation du modèle *distance driven*. Son principe est basé sur une rotation d'image, opération qui peut être particulièrement bien optimisée, en particulier si l'on déporte le calcul sur GPU.

Précisément dans le cas 2D, pour calculer la projection dans la direction θ , on fait subir à l'image une rotation autour de son centre d'angle $-\theta$. Ainsi, le calcul de la projection le long de cette direction θ est réduit à une simple addition des valeurs de tous les pixels au long de chaque colonne de l'image tournée (*cf.* Fig. 3.16). De plus, la rotation d'image peut s'effectuer efficacement en utilisant la transformation RST présentée dans le paragraphe 2.2.2.

En inversant le processus de projection, nous pouvons calculer une rétro-projection (illustrée dans la figure 3.17) de la façon suivante :

1. Pour la ligne de projections à l'angle θ : rétroprojection de cette projection *verticalement* sur une image temporelle (initialisée à zéro),
2. Rotation de cette image temporelle autour de son centre avec un angle θ ;

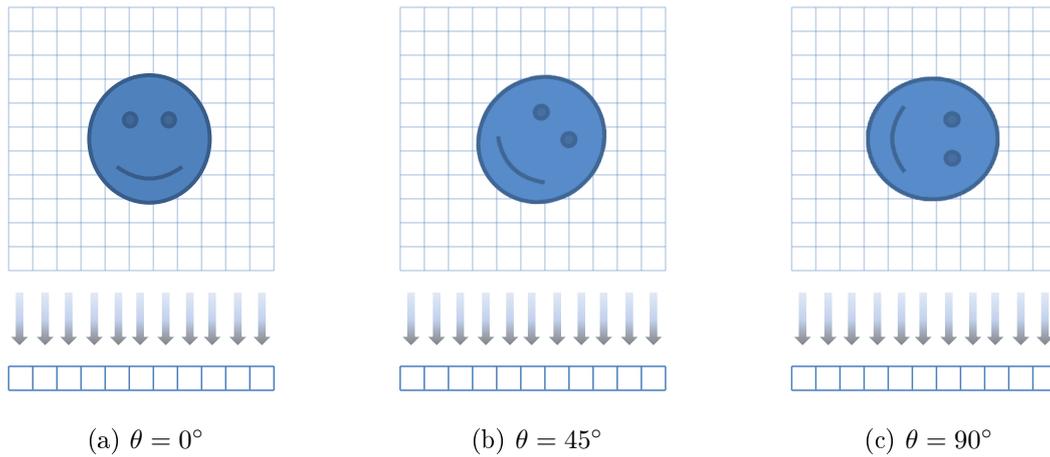


FIGURE 3.16 – Illustration du modèle de projections simplifié.

Les deux étapes ci-dessus sont réalisées pour toutes les projections. Enfin, une sommation de toutes les images temporelles tournées crée une image de rétroprojection de toutes les projections.

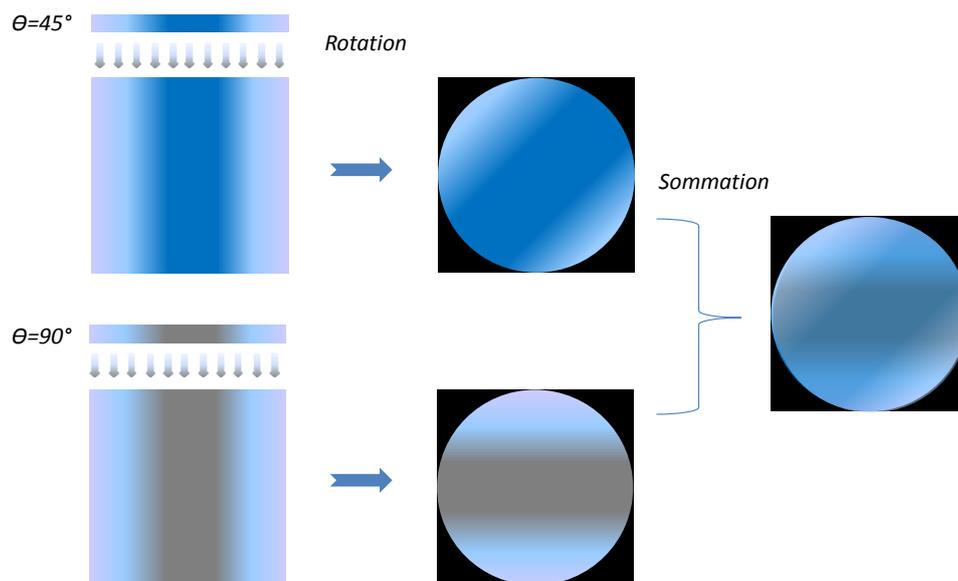


FIGURE 3.17 – Illustration de l'opération de rétro-projection simplifiée pour deux projections à $\theta = 45^\circ, 90^\circ$.

Pour résumer, le projecteur pour une direction θ est :

$$H_\theta = H_0 \cdot R_{-\theta} \quad (3.14)$$

avec H_0 le projecteur dans la direction $\theta = 0$ (simple intégration le long des colonnes) et $R_{-\theta}$ la matrice de rotation d'angle $-\theta$.

Comme $R_{-\theta}^\top = R_\theta$, l'opérateur de rétroprojection s'écrit :

$$H_\theta^\top = R_\theta \cdot H_0^\top. \quad (3.15)$$

3.3.2 Méthode SIRT simplifiée

Notons tout d'abord qu'une méthode de reconstruction de type SIRT peut s'écrire sous la forme de l'équation 1.23 :

$$f^{(\tau+1)} = f^{(\tau)} + \lambda^{(\tau)} H^\top (p - H f^{(\tau)})$$

avec f l'image reconstruite, p les projections, H l'opération de projection, H^\top l'opération de rétroprojection, $\lambda^{(\tau)} \in (0, 1)$ le facteur de relaxation.

L'implantation de cet algorithme s'appuie seulement sur deux opérations : projection et rétroprojection :

1. *Initialisation.* Choisir $\tau = 0$, $f^{(0)} = H^\top p$, λ^τ et τ_{max} le nombre d'itérations
2. *Projection.* $\hat{p}^{(\tau)} = H f^{(\tau)}$
3. *Soustraction.* $\delta p^{(\tau)} = p - \hat{p}^{(\tau)}$
4. *Rétro-projection.* $H^\top (p - H f^{(\tau)}) = H^\top \delta p^{(\tau)}$
5. *Mise à jour de la reconstruction.* $f^{(\tau+1)} = f^{(\tau)} + \lambda^{(\tau)} H^\top (p - H f^{(\tau)}) = f^{(\tau)} + \lambda^{(\tau)} H^\top \delta p^{(\tau)}$
6. *Vérification du critère d'arrêt.* Si $\tau = \tau_{max}$, arrêter les itérations. Sinon, incrémenter τ et retourner à l'étape 2.

Chacune de ces opérations peut être parallélisée efficacement en utilisant les processeurs graphiques (GPUs). Cela nous permet de réduire de manière significative le temps de calcul (voir Annexe C pour plus de détails). Dans notre implantation, nous fixons la valeur de $\lambda^{(\tau)} = 0.9$ pour que la reconstruction converge assez vite. Notons qu'il n'y a pas de test de convergence dans cet algorithme ; le choix de nombre d'itérations est donc crucial. Un nombre d'itérations trop grand renforcera le bruit dans le tomogramme (l'algorithme diverge après un certain nombre d'itérations).

3.4 Segmentation du volume reconstruit

La segmentation est une étape indispensable pour obtenir des informations quantitatives (volume, surface spécifique, etc...) d'un volume reconstruit. Les méthodes conventionnelles de segmentation sans aucune intervention manuelle sont des approches globales utilisant l'histogramme de l'image, comme par exemple : la maximisation de la variance interclasse (MVI) [Otsu (1975)], la maximisation de l'entropie [Kapur *et al.* (1985)], les méthodes des nuées dynamiques (ou k-moyennes) [Huang et Wang (1995)], etc... Ces méthodes sont automatiques, mais elles ne sont pas reliées aux données initiales qui sont les projections et elles ne fournissent pas d'information sur des niveaux d'intensité correspondant à chacune des classes. Pour pallier ce problème, Batenburg et Sijbers [Batenburg et Sijbers (2007a)] ont proposé une autre approche de la segmentation destinée spécifiquement au volume tomographique dont le principe est de minimiser une distance, nommée "distance de projection" (en anglais *projection distance*), définie comme la différence entre les projections réelles et celles calculées à partir du volume reconstruit segmenté [Batenburg et Sijbers (2009)], [Van Aarle *et al.* (2012)]. Cette approche permet d'estimer non seulement des valeurs de seuil mais aussi des niveaux de gris correspondant à chacune des classes.

3.4.1 Critère distance de projection

Batenburg et Sijbers (2009) supposent que l'objet $f \in \mathbb{R}^N$ a été bien reconstruit, qu'il satisfait approximativement l'équation 1.20, et que l'objet réel est composé de seulement quelques matériaux différents s dont les valeurs d'intensité réelles $\rho \in \mathbb{R}^s$ sont inconnues.

L'objectif de la segmentation est d'assigner à un voxel d'intensité ν une valeur de ρ selon la fonction de seuillage suivante :

$$r_{\rho,\ell}(\nu) = \begin{cases} \rho_1 & \text{si } \nu < \ell_1 \\ \rho_2 & \text{si } \ell_1 \leq \nu < \ell_2 \\ \dots & \\ \rho_s & \text{si } \ell_{s-1} \leq \nu \end{cases} \quad (3.16)$$

avec $\ell \in \mathbb{R}^{s-1}$ les valeurs de seuil. La fonction de seuillage est appliquée à chaque voxel de l'objet reconstruit f pour produire un objet segmenté :

$$r_{\rho,\ell}(f) = (r_{\rho,\ell}(f_1), r_{\rho,\ell}(f_2), \dots, r_{\rho,\ell}(f_N)) . \quad (3.17)$$

Batenburg et Sijbers définissent la distance de projection $d(\rho, \ell)$ comme :

$$d(\rho, \ell) = \|p - H \cdot r_{\rho,\ell}(f)\|_2 \quad (3.18)$$

avec $p \in \mathbb{R}^M$ les projections réelles et $H \in \mathbb{R}^{M \times N}$ la matrice de projection.

Le problème de segmentation basée sur la distance de projection consiste alors à chercher ρ et ℓ qui minimisent $d(\rho, \ell)$. [Roelandts et al. \(2012\)](#) et [Van Aarle et al. \(2012\)](#) ont résolu ce problème par l'algorithme du Simplex de Nelder & Mead. Nous présentons ci-après un nouvel algorithme de segmentation basé sur une optimisation globale du critère $d(\rho, \ell)$.

3.4.2 Segmentation basée sur une optimisation globale

Sans compliquer le problème, nous pouvons gagner en robustesse en définissant la métrique d'après le terme d'attache aux données qui prend en compte le poids statistique W des projections.

$$d(\rho, \ell) = \|p - H \cdot r_{\rho, \ell}(f)\|_W. \quad (3.19)$$

Notons que si les seuils ℓ sont connus alors trouver les meilleurs niveaux ρ revient à résoudre un problème d'optimisation quadratique et donc un système d'équations linéaires. Ainsi, la segmentation peut s'effectuer par une recherche exhaustive sur les seuils, et pour chaque jeu de seuils par le calcul de :

$$d^+(\ell) = \min_{\rho} d(\rho, \ell) = d(\rho^+(\ell), \ell) \quad (3.20)$$

avec :

$$\rho^+(\ell) = \arg \min_{\rho} d(\rho, \ell). \quad (3.21)$$

On choisit ensuite les meilleurs seuils et les meilleurs niveaux de gris :

$$\ell^* = \arg \min_{\ell} d^+(\ell) \quad (3.22)$$

$$\rho^* = \rho^+(\ell^*) \quad (3.23)$$

En discrétisant les seuils possibles sur un nombre fini de valeurs, l'algorithme converge en un temps fini.

Comme nous l'avons remarqué ci-dessus, lorsque les seuils ℓ sont connus, trouver les meilleurs niveaux $\rho^+(\ell)$ (cf. équation 3.21) revient à résoudre le système linéaire (dit des *équations normales*) :

$$\sum_{k'=1}^s (g_k^\top \cdot W \cdot g_{k'}) \rho_{k'}^+ = g_k^\top \cdot W \cdot p \quad (\forall k = 1, \dots, s) \quad (3.24)$$

avec $g_k = H \cdot u_k$ la projection de u_k qui est le masque de même dimension que l'objet reconstruit f et valant 1 pour les voxels où f est compris entre les seuils ℓ_{k-1} et ℓ_k et zéro ailleurs. Remarquons que l'objet segmenté peut se décrire ainsi : $r_{\rho, \ell}(f) = \sum_{k=1}^s \rho_k u_k$. Le calcul de g_k

est très simple : pour un angle de projection donné, g_k^i est le nombre de voxels de niveau ρ_k traversés par le rayon aboutissant au pixel i du détecteur. Le système (3.24) est de taille $s \times s$ et peut être résolu rapidement par une méthode numérique standard comme la décomposition de Cholesky.

Afin de réduire le temps de calcul, le premier jeu de seuils $\ell^{(0)}$ peut-être initialisé par une méthode de segmentation conventionnelle (MVI, par exemple). Ensuite, on fait varier $\ell \in [\ell^{(0)} - \varepsilon, \ell^{(0)} + \varepsilon]$ par pas de 1 afin de trouver ℓ^* et ρ^* . Notons que ε est un paramètre permettant de fixer la plage de variation de seuils ; il est relativement petit et inférieur à la distance entre 2 valeurs de seuils consécutives.

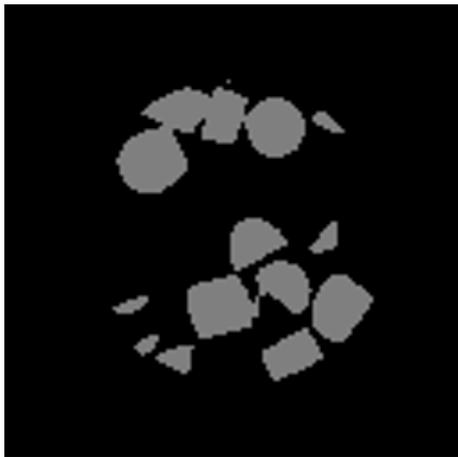
3.4.3 Application pour la nanotomographie

Dans notre cas d'étude, s est limité à 2 (ou 3) (voir Section 1.3.3) donc $\ell = 1$ (ou 2 respectivement). La recherche exhaustive sur tous les seuils possibles peut s'effectuer efficacement et relativement rapidement. Nous illustrons ici le cas où $s = 2$ (l'objet contient seulement un type de matériau). Dans un tel cas, notre algorithme de segmentation s'écrit :

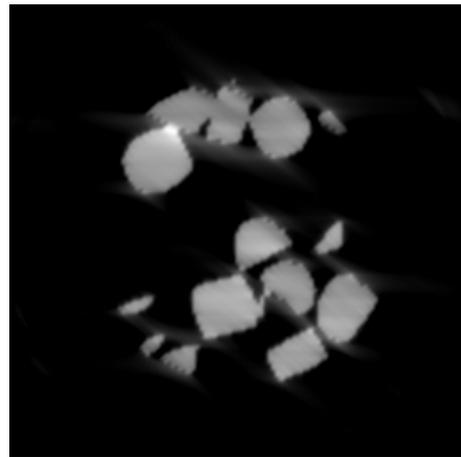
1. Convertir les valeurs de gris de f en 8 bits.
2. Estimer un seuil initial $\ell^{(0)}$ par une méthode de segmentation conventionnelle (MVI, par exemple), le seuil $\ell^{(0)}$ sépare f en deux classes de pixels.
3. Choisir ε et faire varier $\ell \in [\ell^{(0)} - \varepsilon, \ell^{(0)} + \varepsilon]$, par pas de 1. Calculer la distance de projection $d^+(\ell) = d(\rho^+(\ell), \ell)$ (cf. équation 3.19) pour chaque position de ℓ et en choisissant les meilleurs niveaux $\rho^+(\ell)$ donnés par la résolution du système des équations normales (3.24).
4. Choisir la valeur de ℓ qui minimise $d^+(\ell)$.

3.4.4 Validation

Nous montrons dans la figure 3.18 un test avec des données de simulation. Nous utilisons les deux méthodes de segmentation : MVI et notre approche basée sur la distance de projection pour segmenter l'image tomographique présentée dans la figure 3.18b. Celle-ci est reconstruite avec la méthode SIRT à partir de 140 projections simulées et générées à partir du fantôme illustré dans l'image 3.18a. Les images segmentées par MVI et distance de projection sont présentées respectivement dans les figures 3.18c et 3.18d. Les images résiduelles entre ces images segmentées et l'image de référence (le fantôme) sont illustrées dans les figures 3.18e et 3.18f. Ces figures montrent qu'un meilleur résultat est obtenu par notre méthode basée sur la distance de projection, particulièrement dans la zone marquée par le cercle en rouge.



(a) Fantôme



(b) Image reconstruite avec SIRT (140 proj.)



(c) Segmentation (b) par MVI



(d) Segmentation (b) par distance de projection



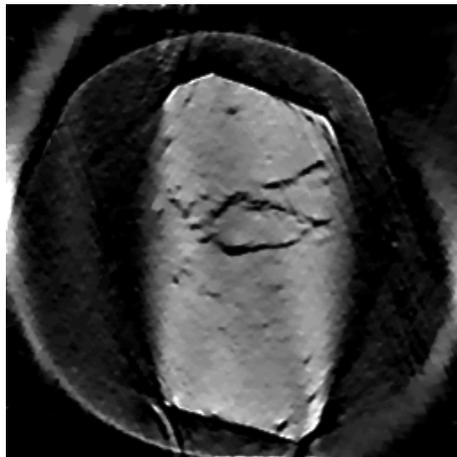
(e) Image résiduelle entre (a) et (c)



(f) Image résiduelle entre (a) et (d)

FIGURE 3.18 – Illustration de la segmentation par MVI et notre méthode basée sur la distance de projection avec des données de simulation.

Testons notre algorithme sur des données réelles. Utilisons la série de projections alignées et le volume reconstruit, obtenus après le test présenté dans la section 2.5.3.2 page 68. La figure 3.19a illustre une coupe en yz du volume reconstruit par la méthode inverse combinée avec la régularisation de type variation totale (TV). Les figures 3.19b et 3.19c représentent respectivement les coupes correspondantes dans les volumes segmentés par MVI et notre méthode basée sur la distance de projection. Nous constatons que la méthode de segmentation donne un meilleur résultat par comparaison à celui obtenu par MVI.



(a)



(b) Segmentation par MVI



(c) Segmentation par distance de projection

FIGURE 3.19 – Segmentation par MVI et notre méthode basée sur la distance de projection avec des données réelles. Coupe en yz du volume reconstruit (a). Coupes correspondantes du volume segmenté par MVI (b) et par notre méthode (c).

3.5 Conclusion

Nous avons développé dans ce chapitre notre nouveau schéma d'*optimisation alternée et alignement alterné*, qui permet d'améliorer la méthode d'*optimisation alternée* présentée dans le chapitre 2. Ce schéma demande non seulement moins de temps de calcul mais s'est avéré aussi plus robuste par rapport à la méthode d'*optimisation alternée*.

Les validations montrent que nous pouvons utiliser une méthode de reconstruction de type SIRT afin d'effectuer l'étape de reconstruction dans les schémas d'optimisation pour diminuer le temps de calcul. La reconstruction finale peut être obtenue à l'aide d'une reconstruction régularisée (approche inverse avec régularisation) sur les projections alignées finales pour pallier le problème de projections manquantes.

Notre modèle de projection basé sur la rotation d'image a également été présenté dans ce chapitre. L'utilisation de ce modèle nous permet d'implanter de façon relativement simple l'algorithme de reconstruction de type SIRT. De plus, chacune des opérations de cet algorithme SIRT peut être accélérée efficacement en utilisant les processeurs graphiques (GPUs). Les stratégies efficaces visant à paralléliser cet algorithme sont détaillées dans l'annexe C ainsi que certaines règles à respecter afin de gagner un facteur d'accélération considérable par rapport à une implantation CPU.

Enfin, nous avons développé une nouvelle méthode de segmentation basée sur le critère "distance de projection". Les tests avec des données de simulation et des données réelles prouvent que notre méthode donne des meilleurs résultats par comparaison avec ceux fournis par une méthode de segmentation conventionnelle.

Chapitre 4

Conclusion générale

Cette thèse avait pour objectif de développer une méthode de reconstruction nanotomographique robuste permettant de corriger les lacunes de l'acquisition de l'objet observé. Dans ce cadre, une méthodologie spécifique a été développée.

Dans un premier temps, la formalisation du problème de tomographie électronique en tant que problème inverse nous a permis de décrire un algorithme itératif et alterné qui explore de façon pertinente l'espace des paramètres et des informations *a priori*.

Dans un deuxième temps, nous avons développé une nouvelle façon de recalibrer deux images par optimisation, qui peut être considérée comme la base du processus d'alignement. Cette approche permet d'obtenir une correction simultanée efficace des quatre facteurs de transformation. Nous l'avons appliquée afin de créer une méthode visant à recalibrer une série de projections (recalage de proche en proche). Nous avons constaté que les projections générées avec cette méthode de recalage de proche en proche présentaient un défaut d'alignement dû à une accumulation des erreurs. En outre, elle ne permet pas de corriger le problème de décalage de l'axe de tilt. Ainsi, le recalage de proche en proche a pour but de pré-aligner les projections et de réduire également les forts déplacements entre les projections successives afin de faciliter l'étape de détermination de l'axe de tilt. Nous avons proposé une solution qui fonctionne bien en pratique pour effectuer cette dernière étape. Notons que cette étape est un élément crucial très peu abordé dans la littérature.

Lorsque les projections sont pré-alignées et l'axe de tilt déterminé, notre méthode d'*optimisation alternée* est ensuite employée pour (i) recalibrer précisément des projections (résolution des problèmes de décalages de projections et décalage de l'axe de tilt) et (ii) réaliser une reconstruction par une approche inverse régularisée pour pallier le problème de projections manquantes. Bien que cette méthode donne de bons résultats, son temps de calcul est relativement long.

Dans un troisième temps, un nouveau processus d'*optimisation alternée et alignement alterné* est présenté. Ce processus est non seulement plus robuste mais il nécessite moins de temps de calcul en comparaison avec la méthode par *optimisation alternée*. Ces avantages ont

été prouvés par des tests sur des données de simulation et des données réelles de supports de catalyseur. Afin d'accélérer encore ce processus, nous avons développé un nouvel algorithme de reconstruction de type SIRT utilisant les processeurs graphiques (GPUs) pour effectuer l'étape de reconstruction dans ce processus. Le volume final reconstruit est obtenu par une reconstruction régularisée sur les projections alignées pour compenser le manque de projections. Finalement, une nouvelle méthode de segmentation basée sur le critère distance de projection a été présentée, permettant d'effectuer ensuite des mesures quantitatives (volume, surface spécifique, etc...) du volume reconstruit.

Annexe A

Relation entre la méthode présentée et la maximisation de corrélation

Afin de présenter les choses simplement, nous traitons ici le cas où les deux images I_1 et I_2 sont mal alignées en translation suivant une seule dimension (OX). Dans un tel cas, la fonction de coût est réduite à :

$$E(\Delta u, a) = \sum_{i=1}^N w_i \cdot [I_1(u_i) - a \cdot I_2(u_i - \Delta u)]^2$$

N est le nombre de pixels dans le domaine d'intérêt (*cf.* Fig. A.1), Δu est le décalage de position, a est un facteur prenant en compte l'atténuation (le contraste), et w est une fonction de pondération (qui peut être une fonction de u_i et $u_i - \Delta u$ désignant les positions des pixels en correspondance dans les deux images).

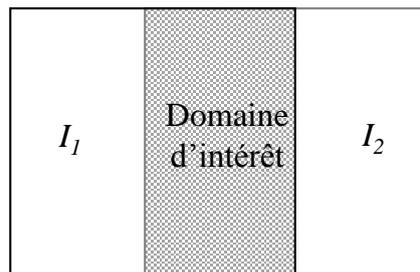


FIGURE A.1 – Le domaine d'intérêt est défini par l'intersection des deux images.

En minimisant $E(\Delta u, a)$ par rapport à a :

$$\frac{\partial E(\Delta u, a)}{\partial a} = 0$$

on obtient :

$$a^+(\Delta u) = \frac{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u)}{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_2(u_i - \Delta u)^2}$$

qui est une fonction de Δu ; en remplaçant dans $E(\Delta u, a)$, on obtient un critère ne dépendant que de Δu :

$$E^+(\Delta u) = E(\Delta u, a^+(\Delta u)) = \sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i)^2 - Q(\Delta u)$$

avec :

$$Q(\Delta u) = \frac{\left[\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u) \right]^2}{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_2(u_i - \Delta u)^2}$$

le premier terme de $E^+(\Delta u)$ ne dépendant pas de Δu , $E^+(\Delta u)$ est minimisé par rapport à Δu si et seulement si $Q(\Delta u)$ est maximisé.

Sous les hypothèses suivantes :

1. les poids sont constants (*i.e.* le niveau de bruit est le même pour tous les pixels),
2. le dénominateur de $Q(\Delta u)$ est pratiquement le même quel que soit Δu ,
3. il n'y a pas d'inversion de contraste entre les deux images (*i.e.* $a^+(\Delta u) > 0$),

la maximisation de $Q(\Delta u)$ équivaut à maximiser :

$$C(\Delta u) = \sum_{i=1}^N I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u)$$

qui correspond au numérateur de $a^+(\Delta x)$ avec les hypothèses ci-dessus, et qui n'est autre que la corrélation croisée entre les deux images. Alors que la troisième hypothèse est raisonnable, les deux autres sont moins évidentes : le niveau de bruit peut dépendre du pixel et, s'il existe des structures dans les images, le dénominateur de $Q(\Delta u)$ dépend de Δu . Notez que, s'il n'y a pas de telles structures (image unie), l'alignement est sans valeur ; ainsi, la deuxième hypothèse ne s'applique pas.

Par rapport au maximum de corrélation, notre méthode dérive du maximum de vraisemblance en faisant moins d'approximations, en particulier concernant la deuxième hypothèse. Pour cette raison, notre méthode est susceptible de fournir de meilleurs résultats dans ces cas de figures.

Annexe B

Quelque notions de base de morphologie mathématique

Les notations présentées ci-dessous sont tirées des supports de cours de morphologie mathématique de Jean Serra¹ et Marc Van Droogenbroeck².

Considérons E le sous ensemble de l'espace discret \mathbb{Z}^2 représentant le support spatial 2D des pixels d'une image et $F \subseteq \mathbb{R}$ l'ensemble de dimension 1 des intensités des pixels. Une fonction f associée à une image est une fonction de E vers F , $f : E \rightarrow F$.

Dilatation et érosion pour images en niveaux de gris

Les opérateurs de morphologie mathématique sont des opérateurs non linéaires basés sur la structure spatiale de l'image. Soit f une fonction représentant une image en niveaux de gris. Les deux opérations de base de la morphologie mathématique en niveaux de gris sont les opérations de dilatation et d'érosion données respectivement par :

$$\delta_b(f)(x) = \sup_{h \in E} (f(x-h) + b(h)) \quad (\text{B.1})$$

$$\varepsilon_b(f)(x) = \inf_{h \in E} (f(x-h) - b(h)) \quad (\text{B.2})$$

avec b une fonction structurante. Le cas plus simple pour b , est de considérer une fonction structurante uniforme définie essentiellement par son support spatial B . B est appelé élément structurant.

Nous illustrons les opérations de dilatation et d'érosion dans la figure B.1

1. <http://cmm.ensmp.fr/~serra/cours/>

2. http://www2.ulg.ac.be/telecom/teaching/notes/totali/elen016/node55_mn.html

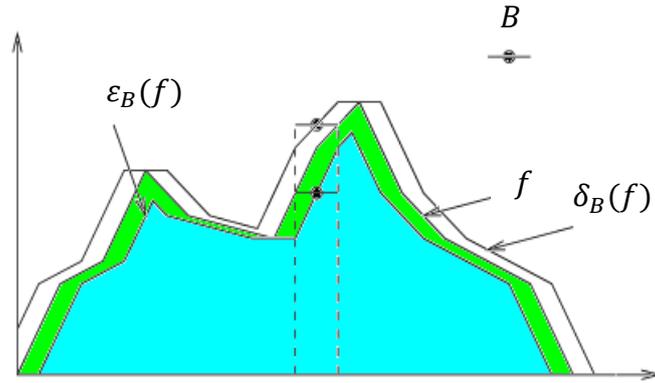


FIGURE B.1 – Dilatation et érosion d’une fonction par un élément structurant B . Source : Cours de Van Droogenbroeck.

Ouverture et fermeture

L’ouverture morphologique $\gamma_B(f)$ et la fermeture morphologique $\varphi_B(f)$ résultent de la mise en cascade de l’érosion et de la dilatation :

$$\gamma_B(f) = \delta_B(\epsilon_B(f)), \quad (\text{B.3})$$

$$\varphi_B(f) = \epsilon_B(\delta_B(f)). \quad (\text{B.4})$$

Les figures B.2a et B.2b montrent le résultat d’une ouverture et d’une fermeture sur une fonction unidimensionnelle.

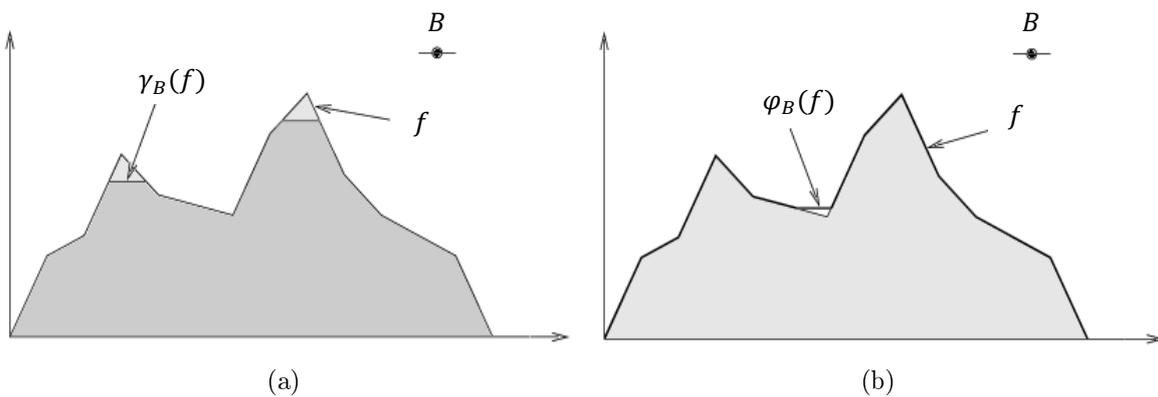


FIGURE B.2 – (a) Ouverture et (b) fermeture d’une fonction. Source : Cours de Van Droogenbroeck.

Ouverture morphologique par reconstruction

Cet opérateur permet d'éliminer les composantes connexes qui n'appartiennent pas à l'ouverture sans modifier les autres. Il est défini à partir de l'opérateur de dilatation géodésique [Serra (1988)]. Soient f et g deux images en niveaux de gris avec $g \leq f$. La dilatation géodésique de taille $n \geq 0$ de g dans f est obtenue par :

$$\begin{aligned} \delta_f^{(n)}(g) &= \underbrace{\delta_f^{(1)} \circ \delta_f^{(1)} \circ \dots \circ \delta_f^{(1)}(g)}_{n \text{ fois}} \\ &= \underbrace{\delta_f^{(1)}(\delta_f^{(1)}(\dots \delta_f^{(1)}(g)))}_{n \text{ fois}} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

avec $\delta_f^{(1)}(g) = (\delta_B(g)) \wedge f$ la dilatation géodésique de taille 1 de g conditionnellement à f ; B est l'élément structurant le plus simple adapté à la trame.

L'ouverture par reconstruction γ_{rec} de g dans f (illustrée en figure B.3) est obtenue par itération d'une dilatation géodésique élémentaire de g dans f jusqu'à la stabilisation :

$$\gamma_{rec}^f(g) = \bigvee_{n \geq 1} \delta_f^{(n)}(g) \quad (\text{B.6})$$

Cet opérateur peut-être implémenté efficacement en utilisant une file d'attente de pixels [Vincent (1993)].

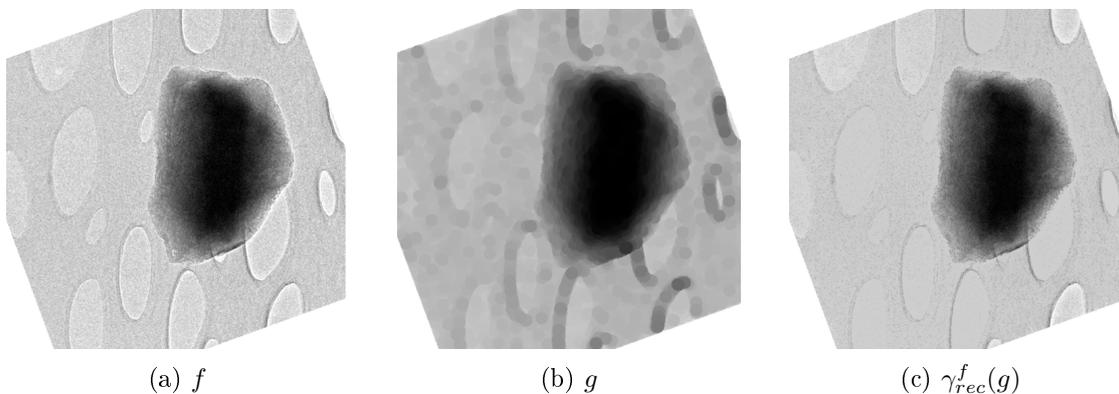


FIGURE B.3 – Illustration de l'ouverture morphologique par reconstruction $\gamma_{rec}^f(g)$. Dans cet exemple, g est obtenue par une érosion de f avec un disque de diamètre 10 pixels comme élément structurant.

Annexe C

SIRT sur Architecture GPU

Dans la première partie de cette annexe, nous introduirons les concepts de programmation GPU en utilisant l'API CUDA. Nous présenterons ensuite quelles stratégies d'implantations que nous avons utilisées pour accélérer l'algorithme SIRT.

Programmation GPU sous CUDA

CUDA (*Computed Unified Device Architecture*) est une plate-forme logicielle et matérielle permettant de piloter les cartes graphiques NVidia afin d'exploiter leurs architectures massivement parallèles pour des applications de calculs intensifs (*SIMD : Single Instruction Multiple Data*). Nous aborderons deux points essentiels qui sont liés par l'API CUDA : l'architecture et le modèle de programmation pour l'architecture Fermi. Nous présenterons ensuite les différentes stratégies utilisées pour l'implantation de l'algorithme SIRT (à géométrie parallèle) afin de pouvoir bénéficier au mieux de l'accélération GPU. On détaillera certains aspects de l'implantation des opérateurs de projection et de rétroprojection.

L'architecture

Le modèle architectural des cartes NVidia est en constante évolution même si toutes les cartes sont compatibles avec la version courante du paradigme de programmation CUDA (5.0). Afin de distinguer quelles sont les fonctionnalités CUDA accessibles par les différentes générations de cartes, le terme *compute capability* est employé par le constructeur. Dans cette annexe nous nous intéresserons plus précisément à l'architecture Fermi (*compute capability = 2.0*), illustrée dans la figure C.1. Ces informations restent néanmoins valables pour les architectures plus avancées de type Kepler.

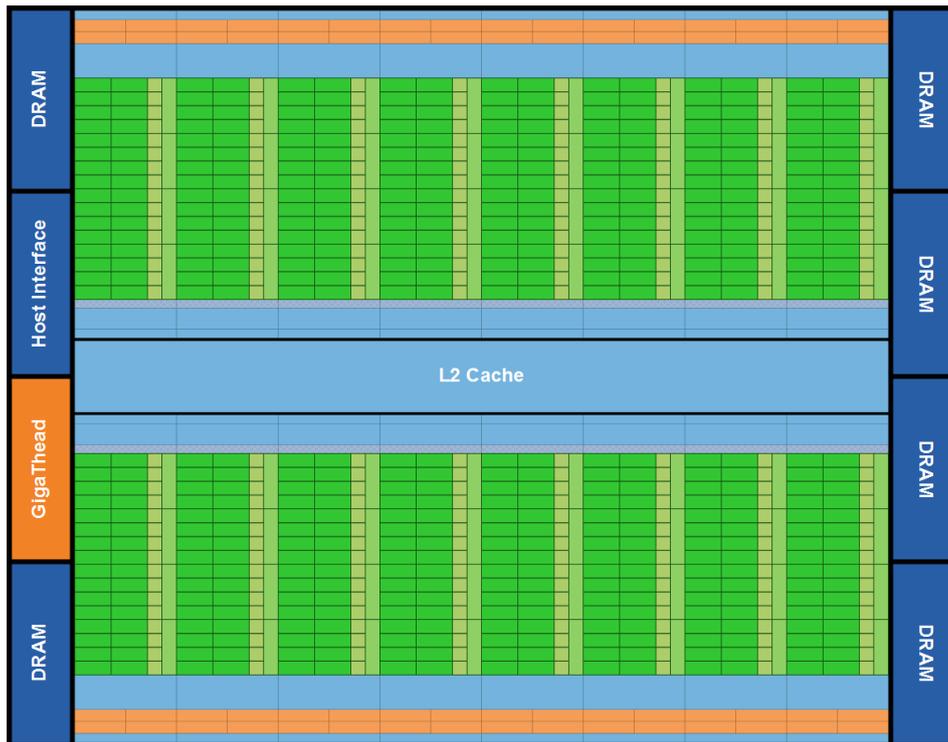


FIGURE C.1 – Architecture Fermi. 16 Streaming Multiprocessor (SMs) sont positionnés autour d'un cache L2 commun. Chaque SM est une bande rectangulaire contenant une portion orange (ordonnanceur et expédition), une portion verte (unités d'exécution), et des portions bleues claires (registres et cache L1). GigaThread distribue des blocs de threads aux SM. HostInterface se connecte le GPU au CPU. Source : NVidia.

Le modèle de programmation

Le modèle de programmation (voir Figure C.2) est fortement lié à l'architecture. Pour exploiter l'architecture massivement parallèle de la carte graphique, le parallélisme est exprimé à trois niveaux de granularité différents :

- La plus petite entité d'exécution est le **warp**. Le *warp* regroupe un ensemble de 32 threads (quantité figée par NVidia) qui traitent la même instruction et qui sont exécutées sur un *Streaming Multiprocessor* (SM) simultanément. Il conviendra donc d'éviter les branchements divergents au sein d'un même warp qui brisent le modèle SIMD et qui induisent une séquentialisation des opérations.
- Le deuxième niveau de granularité est le **bloc**, choisi par le programmeur et qui peut contenir jusqu'à 1024 threads. Un bloc ne peut-être traité que par un SM, mais plusieurs blocs peuvent être traités sur le même SM.
- Le dernier niveau de granularité est la **grille** (plus précisément grille de blocs de threads), souvent déterminée de manière automatique à partir de la taille des blocs et du mapping threads / données voulu par le programmeur.

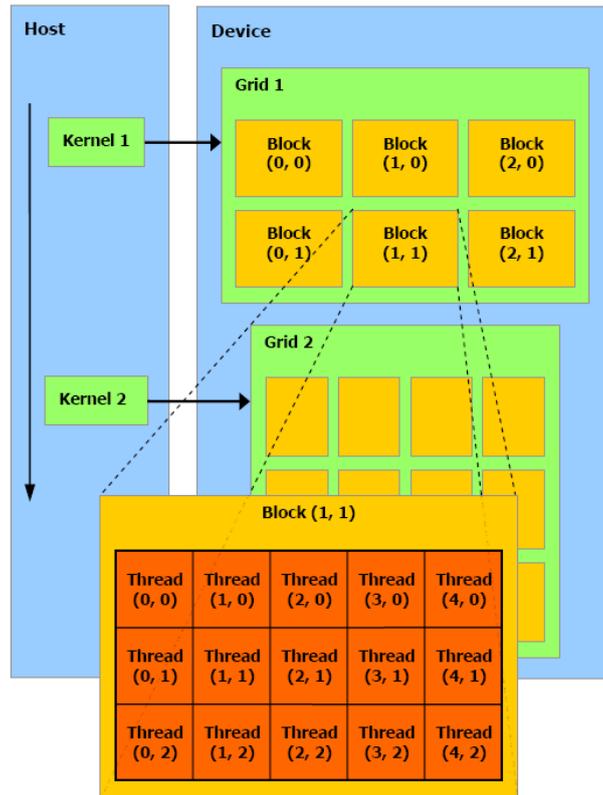


FIGURE C.2 – Modèle de programmation CUDA (grille, bloc, thread). Source : NVidia.

L'exécution d'une séquence d'instructions se fait par l'intermédiaire d'une fonction 'kernel' appelée par le CPU contenant les paramètres de configuration faisant le mapping des ressources matérielles (c'est-à-dire du dimensionnement des threads et des blocs) sur les données à traiter.

Les fonctions 'kernel' agissent comme des fonctions 'template' qui se spécialisent selon le numéro du bloc et du thread. En pratique cela permet de partitionner des opérations indépendantes sur des volumes de données très importants.

Nous présentons ci-après un exemple de fonction 'kernel' :

```

1 //CUDA CONFIGURATION
2 //CREATION D'UN BLOC DE THREADS 2D
3 //CONTENANT 256 THREADS
4 dim3 dimBlock(16, 16, 1);
5 //CREATION DE LA GRID POUR UN MAPPING 1 VOXEL <--> 1 THREAD
6 dim3 dimGrid((W-1)/dimBlockR.x +1, (H-1)/dimBlockR.x +1, 1);
7 //APPEL PAR LE CPU D'UNE FONCTION KERNEL
8 //EXECUTEE SUR LE GPU
9 kernel1<<<dimGrid,dimBlock>>>( ... );

```

La hiérarchie mémoire

Les GPU possèdent différents types de mémoires possédant des capacités, des temps d'accès et des portées différentes. Selon les paramètres de l'application considérée (taille des données, algorithme) on choisira d'utiliser une mémoire ou une autre dans un souci d'optimalité.

Nous allons passer brièvement en revue les différents types de mémoire que l'on peut utiliser (voir [Nvidia (2012a)] pour plus de détails) :

- La **mémoire globale** du GPU ou DRAM
- La **mémoire de texture**
- La **mémoire partagée**
- Les **registres**

La **mémoire globale** du GPU ou DRAM est l'équivalent de la mémoire vive d'un CPU. Elle est la voie d'accès obligatoire des données d'entrées et de sorties entre le GPU et le CPU.

À partir de la génération Fermi, la mémoire globale dispose d'un cache à accès rapide. Par exemple la carte Quadro 4000 dispose de 2 GB de mémoire et d'un cache L1. La mémoire globale peut être accédée en lecture et en écriture par toutes les threads. Afin d'être optimaux, les accès à la mémoire doivent se faire de manière *alignés*, *i.e.* sur une adresse multiple de 32 octets et de manière '*coalesced*' (au sein d'un warp les accès à la mémoire doivent se faire de manière contiguë).

La **mémoire de texture** correspond à un espace limité de la mémoire globale (donc accessible par tous les threads) et dispose aussi d'un cache.

Cette mémoire est particulièrement utile car elle propose, par l'intermédiaire d'un objet *texture*, certaines fonctions d'interpolations et de gestion des effets de bords. L'inconvénient de cette mémoire est qu'elle est accessible en lecture uniquement (on notera toutefois, depuis les cartes à architecture Fermi, l'apparition de la mémoire dite de *surface* qui permet aussi un accès en écriture).

La **mémoire partagée** est une mémoire à accès rapides (cache) plus proche des SMs, qui permet à toutes les threads d'un même bloc de pouvoir travailler de manière coopérative. Cette mémoire est configurable et est limitée à 16KB ou 48KB.

Notons que la mémoire partagée est divisée en 32 bancs mémoires. Il conviendra d'éviter les conflits de bancs (différentes threads accèdent au même banc mémoire) pour éviter la sérialisation des accès.

Les **registres** sont propres à chaque thread d'un bloc. Au maximum, l'architecture Fermi peut allouer 63 registres par thread (typiquement pour des scalaires, ou des petits tableaux alloués statiquement). Si la charge de travail par thread est trop importante, les variables des registres seront écrites / lues 'off chip' dans la mémoire locale (on parle alors de 'registers spilling').

Notons que le programmeur n'a pas accès aux registres, les allocations et les accès sont gérés de manière automatique.

Les heuristiques de bases pour une implantation performante

Certaines heuristiques doivent être respectées pour assurer des gains non-négligeables en temps de calculs par rapport à une implantation CPU [Nvidia (2012b)].

- L'algorithme à implanter doit être massivement parallèle (SIMD).
- Minimiser le nombre de transactions CPU / GPU, ces transferts sont pénalisants pour l'accélération des algorithmes car ils présentent une forte latence.
- Assurer des accès 'coalesced' à la mémoire globale.
- Eviter les branchements conditionnels.

Les paramètres de grille et de bloc doivent être déterminés en tandem. Cependant certaines heuristiques peuvent s'appliquer de manière indépendante au dimensionnement de la grille et des blocs pour s'assurer des performances optimales.

Dimensionnement de la grille :

- Le nombre de blocs doit être strictement supérieur au nombre de SMs. Si cette heuristique n'est pas respectée, certains des SMs seront inactifs.
- Le rapport entre nombre de blocs et nombre de SMs doit être supérieur à 2. En effet, plusieurs blocs peuvent être exécutés en même temps sur un SM. Ceux qui ne sont pas bloqués par une barrière de synchronisation temporelle peuvent garder le SM occupé.
- Le nombre de blocs doit en général être supérieur à 1000. Cela permettra de s'adapter à l'évolution des cartes GPU qui tendent à augmenter le nombre de SMs au fur et à mesure des évolutions et ainsi de garder une implantation performante.

Dimensionnement du bloc :

- Le nombre de threads par bloc doit être un multiple de la taille du warp (32 dans notre cas). Cela permet entre autres de faciliter l'accès de manière 'coalesced' à la mémoire globale.
- Il est conseillé de définir au moins 64 threads par bloc. Un bon compromis est de choisir 4 fois le nombre de cœurs par SM afin de masquer la latence des accès en mémoire (exécution concurrentes des warp à la manière d'un pipeline).

Notons que ces paramètres dépendent beaucoup de l'application et des ressources (registres, mémoire partagée) utilisées par celle-ci.

La carte Quadro 4000

La carte Quadro 4000 possède une *cuda capability* = 2.0. Le tableau C.1 récapitule ses caractéristiques principales [Nvidia (2012a)]. Il est important de connaître les capacités de la carte en terme de mémoire (globale, partagée) et de calculs (nombre de cœurs de calculs, de SMs, nombre maximal de threads par bloc, etc...) afin de pouvoir réaliser une implantation optimisée de l'algorithme.

TABLE C.1 – Caractéristiques de la carte Quadro 4000.

CUDA Driver version	5.0
CUDA Capability	2.0
GLobal Memory	2048 MBytes
8 multiprocesseurs \times 32 CUDA cores	256 CUDA cores
Mémoire partagée	48kB
Taille du warp	32
Max threads par bloc	1024

Accélération de l'algorithme SIRT

Principe de l'implantation

L'algorithme SIRT est un procédé de reconstruction tomographique itératif alternant les étapes de rétroprojection et de projection. Nous nous intéressons ici à la reconstruction d'un volume de données de $512 \times 512 \times 512$ voxels. Nous disposons de 2GB de mémoire globale, ce qui est suffisant pour réaliser l'allocation des données d'entrée et de sortie sur la carte (notons que la reconstruction d'un volume de $1024 \times 1024 \times 1024$ voxels nécessiterait un découpage au préalable du problème, ce point n'est pas abordé dans cette annexe).

Nous avons choisi d'utiliser la mémoire globale et le cache de texture pour implanter l'algorithme SIRT. En effet, pour cette application, la mémoire partagée n'aurait que peu d'utilité car il est impossible d'exploiter le préchargement et la réutilisation des données au sein d'un même bloc. Typiquement, on retrouve les mêmes étapes fondamentales dans le développement d'une implantation sur GPU :

- Allocation des espaces mémoires de travail sur la carte.
- Copie des données du CPU au GPU.
- Calcul.
- Copie des données de sortie du GPU au CPU.
- Libération des ressources.

L'exemple ci-après traduit ces différentes étapes en utilisant les fonctions de l'API CUDA :

```

1 //INITIALISATION DE LA CARTE GPU
2 cudaSetDevice();
3 //ALLOCATION DES BUFFERS D'ENTREE ET DE SORTIE
4 float *d_proj=NULL;
5 gpuErrchk(cudaMalloc( (void**) &d_proj, Z*W*nbang*sizeof(float)));
6 float *d_reconsVol=NULL;
7 gpuErrchk(cudaMalloc( (void**) &d_reconsVol, W*H*Z*sizeof(float)));
8 //COPIE DES DONNEES D'ENTREE CPU --> GPU
9 gpuErrchk(cudaMemcpy(d_proj, h_proj, Z*W*nbang*sizeof(float),
10     cudaMemcpyHostToDevice));
11 //CALCUL SIRT
12 SIRTGPU(...)
13 //COPIES DES DONNES DE SORTIE GPU --> CPU
14 gpuErrchk(cudaMemcpy(h_reconsVol, d_reconsVol, W*H*Z*sizeof(float),
15     cudaMemcpyDeviceToHost));
16 //LIBERATION MEMOIRE GPU
17 gpuErrchk(cudaFree(d_reconsVol));
18 gpuErrchk(cudaFree(d_reconsVoltemp));
19 //LIBERATION RESSOURCES GPU
20 cudaDeviceReset();

```

L'implantation de l'algorithme SIRT sur GPU :

```

1 //SIRT
2 for(int nbiter=0; nbiter<nbSIRTiter; nbiter++)
3 {
4     if(nbiter>0){
5         PROJECTION(d_reconsVol, d_projS, ang, nbang, W, H, Z);
6         PROJDIFF(d_proj, d_projS, nbang, W, H ); }
7         RETROPROJECTION(d_projS,d_reconsVoltemp,ang,nbang,W,H,Z);
8         RECONSVOLUPDATE(d_reconsVol, d_reconsVoltemp, W, H, Z, alpha);
9     }

```

Opérateur de projection

L'algorithme de projection est illustré Figure C.3. Il peut se découper en 3 étapes :

- Extraction d'une frame du volume reconstruit.
- Rotation 2D de l'angle de tilt.
- Sommation en colonne pour obtenir la valeur projetée.

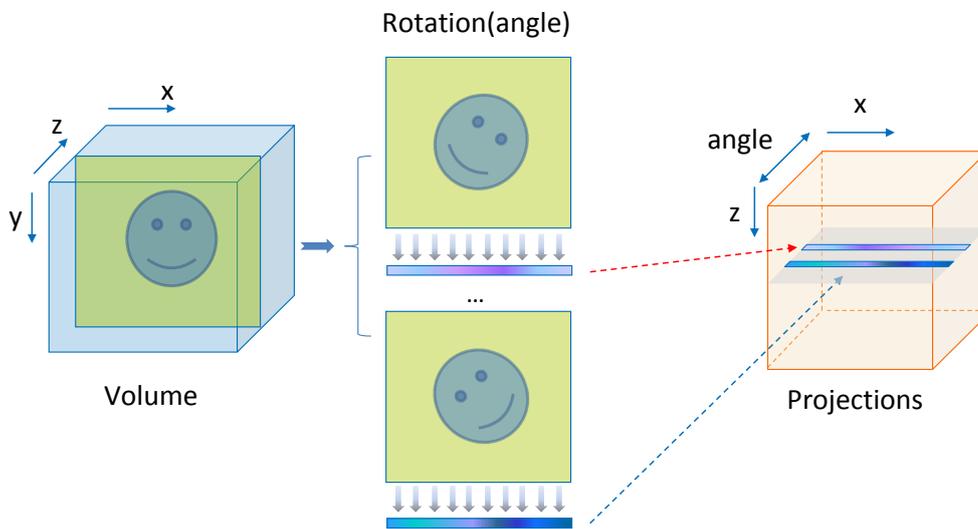


FIGURE C.3 – Principe de l'opérateur de projection.

La trame extraite de la mémoire globale est liée à la mémoire de texture pour pouvoir bénéficier des fonctions d'interpolations par B-Splines cubiques et des accès rapides grâce à leurs localités en 2D [Ruijters *et al.* (2008)].

Ici le mapping défini fait correspondre 1 thread par voxel à traiter. La configuration correspondante pour une image de $512 \times 512 \times 512$ est de 256 threads par bloc 2D (en accord avec les heuristiques données précédemment).

L'exemple ci-après est le code de la fonction 'kernel' de rotation 2D :

```

1  __global__ void
2  Rotation2DKernel( float *d_out, //BUFFER SORTIE
3                   float theta_r, //ANGLE DE ROTATION
4                   int W,
5                   int H)
6  {
7      //CALCUL DES COORDONNEES DE L'IMAGE D'ARRIVEE
8      int x = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
9      int y = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
10     //CENTRAGE DES COORDONNEES
11     float xc = x - (float)W/2;
12     float yc = y - (float)H/2;
13     //CALCUL DES COORDONNEES DE L'IMAGE DE DEPART
14     float tx = xc*_cosf(theta_r) - yc*_sinf(theta_r) + (float)W/2;
15     float ty = xc*_sinf(theta_r) + yc*_cosf(theta_r) + (float)H/2;
16     //ECRITURE DU RESULTAT
17     //texFrame ACCEDE A LA MEMOIRE DE TEXTURE
18     //INTERPOLATION PAR BSPLINE CUBIQUE
19     d_out[y*W + x]=cubicTex2D(texFrame,tx,ty);
20 }

```

La projection s'effectue par sommation en colonne pour garantir l'accès continu ('coalesced') à la mémoire globale. Pour une trame 512×512 on définit des blocs 1D de 512 threads, chacune opérant la somme dans la direction y du volume reconstruit.

L'exemple ci-après est le code de la fonction 'kernel' de l'opérateur de projection :

```

1  __global__ void
2  ProjectionKernel(float *d_in, //BUFFER ENTREE
3                 float *d_out, //BUFFER SORTIE
4                 int W)
5  {
6      //INDICE DE LA COLONNE
7      int j = blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x;
8      //SOMME EN COLONNES
9      float res_proj =0.0;
10     for(int ii = 0; ii<W;ii++)
11         res_proj += d_in[ ii*W +j];
12     //ECRITURE DU RESULTAT
13     d_out[j] = res_proj*(2.0/(float)W);
14 }

```

Opérateur de rétroprojection

L'algorithme de rétroprojection est illustré Figure C.4. Il peut se découper en 3 étapes :

- Reconstitution de la trame.
- Rotation 2D de l'angle de tilt.
- Sommation voxel à voxel avec le volume reconstruit.

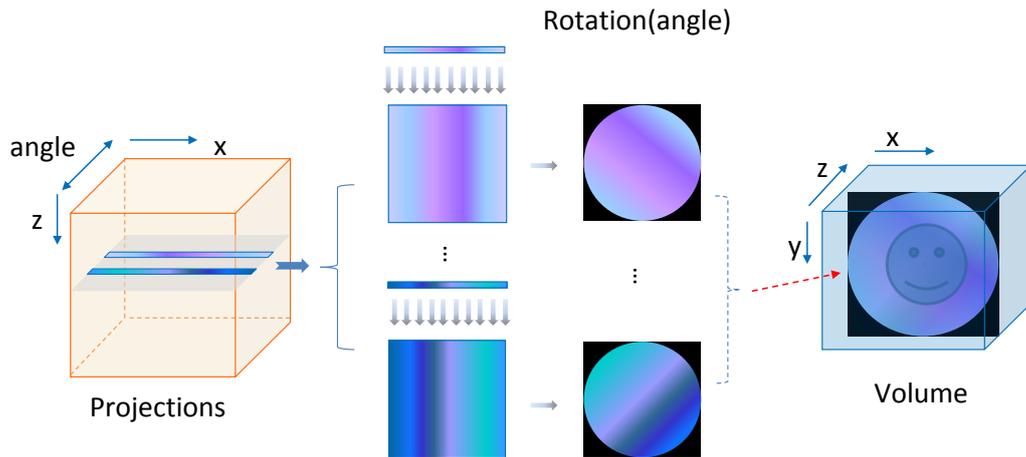


FIGURE C.4 – Principe de l'opérateur de rétroprojection.

De même que pour l'opérateur de projection, la frame à rétroprojeter est liée à la mémoire globale dans un cache de texture. On utilise aussi les fonctions d'interpolation par B-Splines cubiques pour interpoler les valeurs des voxels après la rotation. L'exemple ci-après est le code de la fonction 'kernel' de l'opérateur de rétroprojection :

```

1 //RETROPROJECTION
2 __global__ void
3 RotateAndReprojKernel(float *d_in, //SORTIE
4                       float theta_r,
5                       int W,
6                       int H)
7 {
8     //CALCUL DES COORDONNEES DE L'IMAGE EN SORTIE
9     int x = blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x;
10    int y = blockIdx.y*blockDim.y+threadIdx.y;
11    //CENTRAGE
12    float xc = x - (float)W/2;
13    float yc = y - (float)H/2;
14    //CALCUL DES COORDONNEES DANS LA FRAME A RETROPROJETER
15    //(DEJA CHARGEE DANS LE CACHE DE TEXTURE)
16    float tx = xc*_cosf(theta_r) - yc*_sinf(theta_r) + (float)W/2;
17    float ty = xc*_sinf(theta_r) + yc*_cosf(theta_r) + (float)H/2;
18    //ECRIURE DE LA VALEUR INTERPOLEE DANS BUFFER DE SORTIE
19    d_in[y*W + x]+=cubicTex2D(texFrame,tx,ty);
20 }

```

Temps de calculs

Il est nécessaire de réaliser au moins 50 itérations de l'algorithme SIRT pour obtenir un volume reconstruit de qualité correcte.

Le tableau C.2 illustre les temps de calculs pour une itération de l'algorithme SIRT : sur une carte NVidia Quadro 4000 avec 2GB de mémoire globale, 256 cœurs de calculs et sur 1 cœur du processeur Intel Core 2 Duo CPU 2.54 GHz avec 8GB de mémoire. Les interpolations sont faites par B-Splines cubiques.

TABLE C.2 – Les temps de calcul pour une itération de SIRT par CPU et GPU.

	CPU	GPU
256 × 256 × 256 et 142 projections	2304 secondes	10 secondes
512 × 512 × 512 et 143 projections	18936 secondes	43 secondes

Bibliographie

- AMAT, F., MOUSSAVI, F., COMOLLI, L. R., ELIDAN, G., DOWNING, K. H. et HOROWITZ, M. (2008). Markov random field based automatic image alignment for electron tomography. *Journal of structural biology*, 161(3):260–275.
- AVERBUCH, A., COIFMAN, R. R., DONOHO, D. L., ELAD, M. et ISRAELI, M. (2006). Fast and accurate polar Fourier transform. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 21(2):145–167.
- AYACHE, J., BEAUNIER, L., BOUMENDIL, J., EHRET, G. et LAUB, D. (2007). *Guide de la préparation des échantillons pour la Microscopie électronique en transmission : Volume 1*. Publications de l'Université de Saint-Etienne.
- BATENBURG, K. J., BALS, S., SIJBERS, J., KÜBEL, C., MIDGLEY, P., HERNANDEZ, J., KAISER, U., ENCINA, E., CORONADO, E. et VAN TENDELOO, G. (2009). 3D imaging of nanomaterials by discrete tomography. *Ultramicroscopy*, 109(6):730–740.
- BATENBURG, K. J. et SIJBERS, J. (2007a). Automatic threshold selection for tomogram segmentation by reprojection of the reconstructed image. In *Lecture Notes in Computer Science*, volume 4673, pages 563–570. Springer.
- BATENBURG, K. J. et SIJBERS, J. (2007b). DART : A fast heuristic algebraic reconstruction algorithm for discrete tomography. In *Image Processing, 2007. ICIP 2007. IEEE International Conference on*, volume 4, pages 133–136. IEEE.
- BATENBURG, K. J. et SIJBERS, J. (2009). Adaptive thresholding of tomograms by projection distance minimization. *Pattern Recognition*, 42(10):2297–2305.
- BRANDT, S., HEIKKONEN, J. et ENGELHARDT, P. (2001b). Multiphase method for automatic alignment of transmission electron microscope images using markers. *Journal of Structural Biology*, 133(1):10–22.
- BRANDT, S., HEIKKONEN, J., ENGELHARDT, P. et al. (2001a). Automatic alignment of transmission electron microscope tilt series without fiducial markers. *Journal of structural biology*, 136(3):201–213.
- BRANDT, S. et ZIESE, U. (2006). Automatic TEM image alignment by trifocal geometry. *Journal of microscopy*, 222(1):1–14.
- BRUYANT, P. P. (2002). Analytic and iterative reconstruction algorithms in SPECT. *Journal of Nuclear Medicine*, 43(10):1343–1358.
- CAMPISI, P. et EGIAZARIAN, K. (2007). *Blind image deconvolution : theory and applications*. CRC Press.

- CASTAÑO-DÍEZ, D., AL-AMOUDI, A., GLYNN, A.-M., SEYBERT, A. et FRANGAKIS, A. S. (2007). Fiducial-less alignment of cryo-sections. *Journal of structural biology*, 159(3):413–423.
- CHAMBOLLE, A. (2004). An algorithm for total variation minimization and applications. *Journal of Mathematical imaging and vision*, 20(1-2):89–97.
- CLAXTON, C. D. et STAUNTON, R. C. (2008). Measurement of the point-spread function of a noisy imaging system. *JOSA A*, 25(1):159–170.
- COLLIEUX, C. (1996). *La Microscopie Électronique*. Presses Universitaires de France.
- CROWTHER, R. (1971). Procedures for three-dimensional reconstruction of spherical viruses by Fourier synthesis from electron micrographs. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. B, Biological Sciences*, 261(837):221–230.
- DAVIDON, W. C. (1991). Variable metric method for minimization. *SIAM Journal on Optimization*, 1(1):1–17.
- DE MAN, B. et BASU, S. (2004). Distance-driven projection and backprojection in three dimensions. *Physics in medicine and biology*, 49(11):2463.
- DE ROSIER, D. et KLUG, A. (1968). Reconstruction of three dimensional structures from electron micrographs. *Nature*, 217:130–134.
- DEMOMENT, G., IDIER, J., GIOVANNELLI, J.-F. et MOHAMMAD-DJAFARI, A. (2001). *Problèmes Inverses en Traitement du Signal et de l'image*. Ed. Techniques de l'Ingénieur.
- DENGLER, J. (1989). A multi-resolution approach to the 3D reconstruction from an electron microscope tilt series solving the alignment problem without gold particles. *Ultramicroscopy*, 30(3):337–348.
- FRANK, J. et MCEWEN, B. F. (1992). Alignment by cross-correlation. *Electron Tomography ; Three Dimensional Imaging with the Transmission Electron Microscope*, 8:205–213.
- GILBERT, J. C. et LEMARÉCHAL, C. (1989). Some numerical experiments with variable-storage quasi-Newton algorithms. *Mathematical programming*, 45(1-3):407–435.
- GILBERT, P. (1972). Iterative methods for the three-dimensional reconstruction of an object from projections. *Journal of Theoretical Biology*, 36(1):105–117.
- GÎRLEANU, M. (2010). *Etude de la structure de films minces de nitrure de titane et d'aluminium $Ti_{1-x}Al_xN$ ($0 \leq x \leq 1$) et de son rôle sur l'indentation*. Thèse de doctorat, Université de Haute Alsace-Mulhouse.
- GORDON, R., BENDER, R. et HERMAN, G. T. (1970). Algebraic reconstruction techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and X-ray photography. *Journal of theoretical Biology*, 29(3):471–481.
- GORIS, B., Van den BROEK, W., BATENBURG, K. J., HEIDARI MEZERJI, H. et BALS, S. (2012). Electron tomography based on a total variation minimization reconstruction technique. *Ultramicroscopy*, 113:120–130.
- GOUDAIL, F., RUCH, O. et RÉFRÉGIER, P. (2000). Deconvolution of several versions of a scene perturbed by different defocus blurs : influence of kernel diameters on restoration quality and on robustness to kernel estimation. *Applied optics*, 39(35):6602–6612.

- GREGOR, J. et BENSON, T. (2008). Computational analysis and improvement of SIRT. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 27(7):918–924.
- HAWKES, P. (2006). The electron microscope as a structure projector. In *Electron tomography : methods for three-dimensional visualization of structures in the cell*, pages 83–111. Springer.
- HERMAN, G. T. (2009). *Fundamentals of computerized tomography : image reconstruction from projections*. Springer.
- HOUBEN, L. et BAR SADAN, M. (2011). Refinement procedure for the image alignment in high-resolution electron tomography. *Ultramicroscopy*, 111(9):1512–1520.
- HUANG, L.-K. et WANG, M.-J. J. (1995). Image thresholding by minimizing the measures of fuzziness. *Pattern recognition*, 28(1):41–51.
- IDIER, J. (2001). Reconstruction tomographique pour un faible nombre de projections. In *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, page 311. Traité IC2, Série traitement du signal et de l’image, Hermès, Paris.
- JOSEPH, P. M. (1982). An improved algorithm for reprojecting rays through pixel images. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 1(3):192–196.
- KACZMARZ, S. (1937). Angenäherte auflösung von systemen linearer gleichungen. *Bulletin International de l’Académie Polonaise des Sciences et des Lettres*, 35:355–357.
- KAPUR, J. N., SAHOO, P. K. et WONG, A. K. C. (1985). A new method for gray-level picture thresholding using the entropy of the histogram. *Computer vision, graphics, and image processing*, 29(3):273–285.
- KETCHAM, R. A., SLOTTKE, D. T. et SHARP, J. M. (2010). Three-dimensional measurement of fractures in heterogeneous materials using high-resolution X-ray computed tomography. *Geosphere*, 6(5):499–514.
- KOBAYASHI, A., FUJIGAYA, T., ITOH, M., TAGUCHI, T. et TAKANO, H. (2009). Technical note : A tool for determining rotational tilt axis with or without fiducial markers. *Ultramicroscopy*, 110(1):1–6.
- LAGARIAS, J. C., REEDS, J. A., WRIGHT, M. H. et WRIGHT, P. E. (1998). Convergence properties of the Nelder–Mead simplex method in low dimensions. *SIAM Journal on Optimization*, 9(1):112–147.
- LIU, D. C. et NOCEDAL, J. (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Mathematical programming*, 45(1-3):503–528.
- MATUNGKA, R., ZHENG, Y. F. et EWING, R. L. (2009). Image registration using adaptive polar transform. *IEEE Transactions on Image Processing*, 18(10):2340–2354.
- MEYER, F. (1979). *Cytologie quantitative et morphologie mathématiques*. Thèse de doctorat, École des Mines de Paris.
- MIDGLEY, P., WEYLAND, M. *et al.* (2003). 3D electron microscopy in the physical sciences : the development of Z-contrast and EFTEM tomography. *Ultramicroscopy*, 96(3-4):413–432.

- MIRONE, A., GOUILLART, E., BRUN, E., TAFFOREAU, P. et KIEFFER, J. (2013). PyHST2 : an hybrid distributed code for high speed tomographic reconstruction with iterative reconstruction and a priori knowledge capabilities. *arXiv preprint arXiv :1306.1392*.
- MOMEY, F., BECKER, J.-M., DENIS, L., MENNESSIER, C., THIÉBAUT, É. *et al.* (2011a). Modèle direct pour la tomographie 3D : apport d'une approximation par B-splines séparables. *In Actes du XXIIIème colloque GRETSI*.
- MOMEY, F., DENIS, L., MENNESSIER, C., THIÉBAUT, E., BECKER, J.-M. et DESBAT, L. (2011b). A new representation and projection model for tomography, based on separable B-splines. *In Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC), 2011 IEEE*, pages 2602–2609. IEEE.
- NATTERER, F. (1985). Fourier reconstruction in tomography. *Numerische Mathematik*, 47(3): 343–353.
- NELDER, J. A. et MEAD, R. (1965). A simplex method for function minimization. *The computer journal*, 7(4):308–313.
- NOCEDAL, J. (1980). Updating quasi-Newton matrices with limited storage. *Mathematics of computation*, 35(151):773–782.
- NOCEDAL, J. et WRIGHT, S. J. (2006). *Numerical optimization*. Springer.
- NVIDIA, C. (2012a). CUDA C Programming Guide 5.0.
- NVIDIA, C. (2012b). NVIDIA CUDA C Best Practices Guide 5.0.
- OTSU, N. (1975). A threshold selection method from gray-level histograms. *Automatica*, 11:23–27.
- OWEN, C. H. et LANDIS, W. J. (1996). Alignment of electron tomographic series by correlation without the use of gold particles. *Ultramicroscopy*, 63(1):27–38.
- POTTS, D. et STEIDL, G. (2000). New Fourier reconstruction algorithms for computerized tomography. *In International Symposium on Optical Science and Technology*, pages 13–23. International Society for Optics and Photonics.
- RADON, J. (1917). Ueber die Bestimmung von Funktionnen durch ihre Integralwerte langs gewisser Mannigfaltigkeiten. *Académie Royale des Sciences de Saxe*, (69):262–77.
- REDDY, B. S. et CHATTERJI, B. N. (1996). An FFT-based technique for translation, rotation, and scale-invariant image registration. *IEEE Transactions on Image Processing*, 5(8):1266–1271.
- RESS, D., HARLOW, M., SCHWARZ, M., MARSHALL, R. et MCMAHAN, U. (1999). Automatic acquisition of fiducial markers and alignment of images in tilt series for electron tomography. *Journal of electron microscopy*, 48(3):277–287.
- RITSCHL, L., BERGNER, F., FLEISCHMANN, C. et KACHELRIESS, M. (2011). Improved total variation-based CT image reconstruction applied to clinical data. *Physics in Medicine and Biology*, 56(6):1545.

- ROELANDTS, T., BATENBURG, K. J., BIERMANS, E., KÜBEL, C., BALS, S. et SIJBERS, J. (2012). Accurate segmentation of dense nanoparticles by partially discrete electron tomography. *Ultramicroscopy*, 114:96–105.
- RUDIN, L. I., OSHER, S. et FATEMI, E. (1992). Nonlinear total variation based noise removal algorithms. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 60(1):259–268.
- RUIJTERS, D., HAAR ROMENY, B. M. et SUETENS, P. (2008). Efficient GPU-based texture interpolation using uniform B-splines. *Journal of Graphics, GPU, and Game Tools*, 13(4):61–69.
- SALI, A., GLAESER, R., EARNEST, T. et BAUMEISTER, W. (2003). From words to literature in structural proteomics. *Nature*, 422(6928):216–225.
- SERRA, J. (1982). *Image analysis and mathematical morphology*. Academic Press London.
- SERRA, J. (1988). *Image Analysis and Mathematical Morphology : Vol. : 2 : Theoretical Advances*. Academic Press.
- SIDKY, E. Y., KAO, C.-M. et PAN, X. (2006). Accurate image reconstruction from few-views and limited-angle data in divergent-beam CT. *Journal of X-ray Science and Technology*, 14(2):119–139.
- SORZANO, C. O., MESSAOUDI, C., EIBAUER, M., BILBAO-CASTRO, J. R., HEGERL, R., NICKELL, S., MARCO, S. et CARAZO, J. M. (2009). Marker-free image registration of electron tomography tilt-series. *BMC bioinformatics*, 10(1):124.
- SORZANO, C. O. S., MARABINI, R., PASCUAL-MONTANO, A., SCHERES, S. H. et CARAZO, J. M. (2006). Optimization problems in electron microscopy of single particles. *Annals of Operations Research*, 148(1):133–165.
- TARANTOLA, A. (1987). *Inverse problem theory*, volume 130. Elsevier.
- THÉVENAZ, P., BLU, T. et UNSER, M. (2000). Interpolation revisited [medical images application]. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 19(7):739–758.
- THIBON, L. (2013). Développement d’un outil de déconvolution destiné à la restauration d’images coronarographiques. Mémoire de Master, CPE Lyon.
- THIÉBAUT, E. (2005). Introduction to image reconstruction and inverse problems. *In Optics in Astrophysics*, pages 397–422. Springer.
- TIKHONOV, A. N. (1963). Regularization of incorrectly posed problems. *In Soviet Math. Dokl*, volume 4, pages 1624–1627.
- TZIMIROPOULOS, G., ARGYRIOU, V., ZAFEIRIOU, S. et STATHAKI, T. (2010). Robust FFT-based scale-invariant image registration with image gradients. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 32(10):1899–1906.
- VAN AARLE, W., BATENBURG, K. J. et SIJBERS, J. (2012). Automatic parameter estimation for the discrete algebraic reconstruction technique (DART). *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(11):4608–4621.
- VINCENT, L. (1993). Morphological grayscale reconstruction in image analysis : Applications and efficient algorithms. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2(2):176–201.

- WANG, Z., BOVIK, A. C., SHEIKH, H. R. et SIMONCELLI, E. P. (2004). Image quality assessment : From error visibility to structural similarity. *IEEE Transactions on Image Processing*, 13(4):600–612.
- WERNICK, M. N. et AARSVOLD, J. N. (2004). *Emission tomography : the fundamentals of PET and SPECT*. Academic Press.
- WINKLER, H., TAYLOR, K. A. *et al.* (2006). Accurate marker-free alignment with simultaneous geometry determination and reconstruction of tilt series in electron tomography. *Ultramicroscopy*, 106(3):240.
- YANG, C., NG, E. G. et PENCZEK, P. A. (2005). Unified 3-D structure and projection orientation refinement using quasi-Newton algorithm. *Journal of structural biology*, 149(1):53–64.
- ZOKAI, S. et WOLBERG, G. (2005). Image registration using log-polar mappings for recovery of large-scale similarity and projective transformations. *IEEE Transactions on Image Processing*, 14(10):1422–1434.

Articles acceptés

Revue scientifique :

- Tran, V. D., Moreaud, M., Thiébaud, É., Denis, L., & Becker, J. M. (2013). Inverse Problem Approach for the Alignment of Electron Tomographic series; in press; *Oil and Gas Science and Technology, OGST*.

Conférences internationales :

- Tran, V. D., Moreaud, M., Thiébaud, É., Denis, L., & Becker, J. M. (February, 2013). Robust registration of electron tomography projections without fiducial markers. In *IS&T/SPIE Electronic Imaging* (pp. 86570R-86570R).
- Tran, V. D., Moreaud, M., Thiébaud, É., Denis, L., & Becker, J. M. (July, 2013). Joint reconstruction and refined registration for electron tomography. In *1st International Conference on Tomography of Materials and Structures*.

Inverse Problem Approach for the Alignment of Electron Tomographic series

V.D. TRAN^{1,3*}, M. MOREAUD¹, É. THIÉBAUT², L. DENIS³ and J.M. BECKER³

¹ IFP Energies nouvelles, Technology, Computer Science and Applied Mathematics Division, BP 3, 69360 Solaize - France

² Observatoire de Lyon, CRAL CNRS UMR 5574, Université de Lyon, France

³ Laboratoire Hubert Curien, UMR CNRS 5516, Université de Saint-Etienne, France

e-mail: viet-dung.tran@ifpen.fr — maxime.moreaud@ifpen.fr — eric.thiebaut@univ-lyon1.fr — loic.denis@univ-st-etienne.fr — becker@cpe.fr

*Corresponding author

Résumé — *Approche problème inverse pour l'alignement de séries en tomographie électronique* —

Dans le domaine du raffinage, les mesures morphologiques de particules sont devenues indispensables pour caractériser les supports de catalyseurs. À travers ces paramètres, on peut remonter aux spécificités physico-chimiques des matériaux étudiés. Une des techniques d'acquisition utilisées est la tomographie électronique (ou nanotomographie). Des volumes 3D sont reconstruits à partir de séries de projections sous différents angles obtenues par microscopie électronique en transmission (MET). Cette technique permet d'obtenir une réelle information tridimensionnelle à l'échelle du nanomètre. Un problème majeur dans ce contexte est le mauvais alignement des projections qui contribuent à la reconstruction. Les techniques d'alignement actuelles emploient habituellement des marqueurs de référence tels que des nanoparticules d'or pour un alignement correct des images. Lorsque l'utilisation de marqueurs n'est pas possible, l'alignement de projections adjacentes est obtenues par corrélation entre ces projections. Cependant, cette méthode échoue parfois. Dans cet article, nous proposons une nouvelle méthode basée sur une approche de type problème inverse où un certain critère est minimisé en utilisant une variante de l'algorithme de Nelder et Mead, qui exploite le concept de simplexe. Elle est composée de deux étapes. La première étape consiste en un processus d'alignement initial s'appuyant sur la minimisation d'une fonction de coût basée sur des statistiques robustes, mesurant la similarité entre une projection et les projections précédentes de la série. Elle vise à réduire les forts déplacements, résultant de l'acquisition entre les projections successives. Dans la seconde étape, les projections pré-recalées sont employées pour initialiser un processus itératif et alterné d'alignement et reconstruction, minimisant alternativement une fonction de coût basée sur la reconstruction du volume et une fonction basée sur l'alignement d'une projection avec sa version simulée obtenue à partir du volume reconstruit. À la fin de ce processus, nous obtenons une reconstruction correcte du volume, les projections étant correctement alignées. Notre méthode a été testée sur des données simulées et prouve qu'elle récupère d'une manière précise les changements dans les paramètres de translation, rotation et mise à l'échelle. Nous avons testé avec succès notre méthode pour les projections réelles de différents supports de catalyseur.

Abstract — *Inverse Problem Approach for the Alignment of Electron Tomographic series* — *In the refining industry, morphological measurements of particles have become an essential part in the characterization catalyst supports. Through these parameters, one can infer the specific physicochemical*

properties of the studied materials. One of the main acquisition techniques is electron tomography (or nanotomography). 3D volumes are reconstructed from sets of projections from different angles made by a transmission electron microscope (TEM). This technique provides a real three-dimensional information at the nanometric scale. A major issue in this method is the misalignment of the projections that contributes to the reconstruction. The current alignment techniques usually employ fiducial markers such as gold particles for a correct alignment of the images. When the use of markers is not possible, the correlation between adjacent projections is used to align them. However, this method sometimes fails. In this paper, we propose a new method based on the inverse problem approach where a certain criterion is minimized using a variant of the Nelder and Mead simplex algorithm. The proposed approach is composed of two steps. The first step consists of an initial alignment process, which relies on the minimization of a cost function based on robust statistics measuring the similarity of a projection to its previous projections in the series. It reduces strong shifts resulting from the acquisition between successive projections. In the second step, the pre-registered projections are used to initialize an iterative alignment-refinement process which alternates between (i) volume reconstructions and (ii) registrations of measured projections onto simulated projections computed from the volume reconstructed in (i). At the end of this process, we have a correct reconstruction of the volume, the projections being correctly aligned. Our method is tested on simulated data and shown to estimate accurately the translation, rotation and scale of arbitrary transforms. We have successfully tested our method with real projections of different catalyst supports.

INTRODUCTION

The term "tomography" refers to all methods of exact reconstruction or - most often - approached reconstruction of the interior of an object from its projections; in other words methods for obtaining information on the composition of an object from the measurements taken outside the object.

Electron tomography (EM) [1] is a very powerful characterization technique for the reconstruction of the 3D nanoscale structure of objects from a series of two-dimensional projections. A series of 2D TEM projections is acquired by tilting the specimen at various angles (usually in the range $\pm 70^\circ$, one projection every degree) around an axis perpendicular to the electron beam (see Fig. 1).

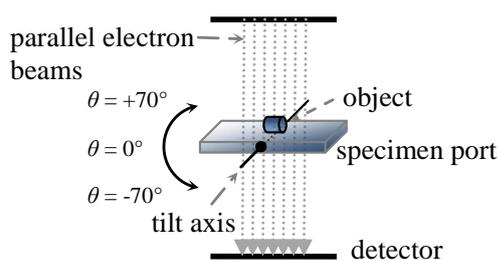


Figure 1
Data collection geometry in 3D reconstruction by TEM.

The geometry of acquisition is parallel (i.e. the electron beam which crosses the sample is rectilinear). In such parallel configurations, simplest reconstruction techniques recast the volume reconstruction into a series of independent 2D reconstructions, each corresponding to a slice perpendicular to the detector. Three main approaches have been devel-

oped in tomography: filtered back-projections (FBP) [2], algebraic reconstruction methods [3–5] and algorithms based on Fourier transform [6, 7].

These reconstruction methods require a precise alignment of the different projections. Because of mechanical imprecision and magnetic lenses defocus, neighboring projections may differ by a shift, a slight tilt and a change in magnification [8]. Currently, the most common alignment technique uses markers' tracking [9–11]. This method uses gold nanoparticles spread onto the surface of the specimen prior to imaging; these particles can be localized very accurately, even at high tilt angles, thanks to their round shape and their sharp contrast. Alignment with markers has two advantages. First, since markers positions measured over the full range of tilt angles are fit to a single set of projection equations, the alignment of the series of projections is guaranteed to be globally consistent. Secondly, the method can be adapted to correct anisotropic and non-uniform changes of the specimen during the tilt series [8]. However, the fiducial markers method has several practical disadvantages. It can be difficult to obtain an appropriate distribution of markers on the specimen, i.e. a distribution as homogeneous as possible, a necessary condition for proper alignment. For high-resolution reconstruction (e.g. reconstructed volume with voxels $< 1\text{nm}^3$), the size of gold nanoparticles (approximately 5nm in diameter) becomes considerable and troublesome by masking an important part into the body of the reconstruction. Another disadvantage of markers is the need to track their positions accurately, which can be a very costly step. Certain approaches [12–14] are based on points of interest automatically extracted from the images, these points are then used to find the alignment parameters.

We deal here with the case where no such markers are

used for alignment. This case can be handled by cross-correlation methods [15–18]. The principle of these techniques is based on the alignment between two images. Precisely, the first image of a series of projections is chosen as the reference image, then each image is aligned with the previous image in the series, thereby sequentially compensating image shifts throughout the entire series. Moreover, the accumulation of errors in the estimated parameters is a disadvantage of these methods based on pairwise alignment of images. To overcome this defect, a 3D model-based method is proposed by Dengler [19], in which the alignment parameters were refined by alternating a reconstruction step and an alignment step between the modeled projections and real projections. This method has been developed by several authors [20–22]. In cryoEM for the biological sciences, the 3D model-based method is known as a projection matching [23, 24], which also yields excellent results for X-ray tomography [25].

In this paper, we propose a new method for the alignment of TEM image series without the need for fiducial markers, which recovers in an accurate manner the changes in translation, rotation and scaling parameters. The alignment procedure consists of two stages:

- First, we use an optimization approach to align the series of projections. The aim is to reduce the strong shifts, resulting from the acquisition between successive projections, and to facilitate the following step.
- The pre-aligned projections are then used to initialize an iterative procedure which alternatively restores the 3-D object and accurately aligns the projections.

1 INITIAL ALIGNMENT

1.1 Alignment between two images

Prior to the general case (global alignment of M images), one needs to build an alignment method for 2 images. Four transformation parameters are required: horizontal and vertical translations, rotation and scaling. These parameters define how an image I_t to be registered is transformed into a reference image I_r . We propose a method that is more robust than cross-correlation based approaches (see appendix 3.2). This method finds the parameters of the geometrical transformations by minimizing the mean squared error (MSE) between I_r and I_t :

$$\Delta\phi^* = \arg \min_{\Delta\phi} E(\Delta\phi) \quad (1)$$

with:

$$E(\Delta\phi) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [I_r(u_i) - (R_{\Delta\phi} \cdot I_t)(u_i)]^2 \quad (2)$$

The u_i are the pixels' coordinates, $R_{\Delta\phi}$ is a linear operator which interpolates its argument in order to apply a geometrical transformation of the image specified by the parameters $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$ corresponding respectively to the horizontal and vertical shifts of a translation, the angle of a rotation and the magnification scale (see section 1.2). N is the number of pixels in the domain of interest (see Fig. 2), which depends on $\Delta\phi$. In our application, $\Delta u_x \in [-W/2, W/2]$ and $\Delta u_y \in [-H/2, H/2]$ with W, H the width and height of the image.

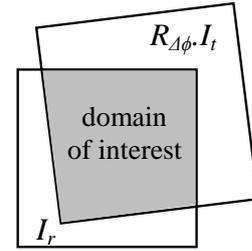


Figure 2

Domain of interest: intersection of two images.

The Nelder & Mead simplex algorithm [26], implemented as described in [27], is used to solve (1). This derivative-free optimization method evaluates iteratively $E(\Delta\phi)$ until a minimum is found. By simply changing the definition of $E(\Delta\phi)$, our approach can be readily adapted to a large class of similar problems. For instance, we have modified our method to use the SSIM (Structural SIMilarity) index [29] for finding the best parameters. We however found that the resulting algorithm is unstable for some pairs of images; for that reason, we advocate to use the MSE criterion given in Eq. (2). Nevertheless, as shown by Fig. 6, minimizing the MSE turns out to also yield a better SSIM than conventional registration methods.

The initialization step deserves some explanations. The shifts $\Delta u_x, \Delta u_y$ are pre-estimated by means of cross-correlation. The rotation and scale parameters between two successive TEM images are very small: $\Delta\varphi$ does not exceed $\pm 2^\circ$ and Δs is in the range $\pm 0.5\%$; therefore we start the optimization with $\Delta\varphi^{[0]} = 0$, $\Delta s^{[0]} = 0$ (neither rotation nor scaling change).

Note that, since $R_{\Delta\phi}$ is an interpolation operator which continuously depends on the parameters $\Delta\phi$, minimizing $E(\Delta\phi)$ achieves sub-pixel accuracy for the shift parameters.

1.2 Image transformation

The linear operator $R_{\Delta\phi}$ in Eq. (2) corresponds to the change of coordinates given by the matrix:

$$M_{\Delta\phi} = \begin{bmatrix} (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & (s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & \Delta u_x \\ -(s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & \Delta u_y \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

which depends on $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$. The relation $v = M_{\Delta\phi} \cdot u$ changes the coordinates $u = (u_x, u_y, 1)^T$ in the initial image into the coordinates $v = (v_x, v_y, 1)^T$ in the transformed image. The transform $R_{\Delta\phi}$ is an interpolation operator. On the basis of many experiments, we have found that cubic B-spline interpolation [28] gives better results than nearest neighbors or linear interpolation methods.

1.3 Alignment of a series of projections

We now turn to the case of a series of projections. The first image is chosen as the reference image. By applying our alignment method for two images, each image is aligned with the previous image in the series, thereby sequentially compensating image shifts throughout the entire series. This method minimizes the following cost function:

$$E(\Phi) = \sum_{t=1}^{M-1} \left(\frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} [I_t(u_i) - (R_{\Delta\phi_t} \cdot I_{t+1})(u_i)]^2 \right) \quad (4)$$

where M is the number of images in the sequence, N_t is the number of pixels in the domain of interest between I_t and I_{t+1} , Φ is a set of transformation parameters's vectors:

$$\Phi = \{\Delta\phi_t\}_{t=1}^{M-1} \quad (5)$$

The form of function (4) allows parameters $\Delta\phi_t = (\Delta u_{t,x}, \Delta u_{t,y}, \Delta\varphi_t, \Delta s_t)$ associated with each pair of images to be determined in parallel. Fig. 3 shows the relation between the transformation parameters in a series of images. $\gamma_t = (u_{t,x}, u_{t,y}, \varphi_t, s_t)$, $t = 1, \dots, M-1$ are the pseudo-transformation parameters between images 2, .. M and the first (reference) image. The components of γ_t are:

$$\begin{cases} u_{t,x} &= \text{Coeff. (1,3) of } A_t \\ u_{t,y} &= \text{Coeff. (2,3) of } A_t \\ \varphi_t &= \sum_{i=1}^t \Delta\varphi_i \\ s_t &= \prod_{i=1}^t \Delta s_i \end{cases} \quad (6)$$

with $A_t = R_{\Delta\phi_t} \cdot R_{\Delta\phi_{t-1}} \cdots R_{\Delta\phi_1}$.

1.4 Evaluation of the alignment accuracy

The SSIM index [29] measures the similarity between two images; we use it in order to check the efficiency of our method. The SSIM score, between -1 and 1, achieves its maximum value $\text{SSIM} = 1$ if and only if both images are identical. In our application, the SSIM index gives a degree of similarity in the domain of interest between the reference image and the registered image.

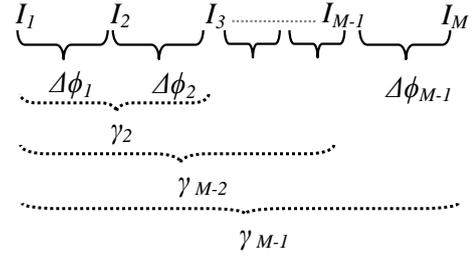


Figure 3
Correspondence between the transformation parameters of the image series.

1.5 Experimental Results

For the following results, we use a series of TEM projections of a standard zeolite powder (CBV712 from Zeolyst). Our algorithm has been implemented and tested with Yorick (<http://yorick.sourceforge.net/>) on 2.6-GHz Intel Core 2 Duo machine. The computation time required for registration an image pair varies depending on the image size and the richness of texture content in the images.

1.5.1 Case without noise

In a first test, a 256×256 reference image I_r of 8-bit grayscale (see Fig. 4(a)) is transformed into a new image I_t by applying a transformation $R_{\Delta\phi}$ to I_r with $\Delta\phi = (-5, 5, -10^\circ, -3\%)$. The corresponding $\text{SSIM}(I_r, I_t)$ is 0.85. I_a is the image after registration of I_t on I_r using the proposed method. The residual image between I_a and I_r is shown in Fig. 4(b), with $\text{SSIM}(I_r, I_a) = 0.99$.

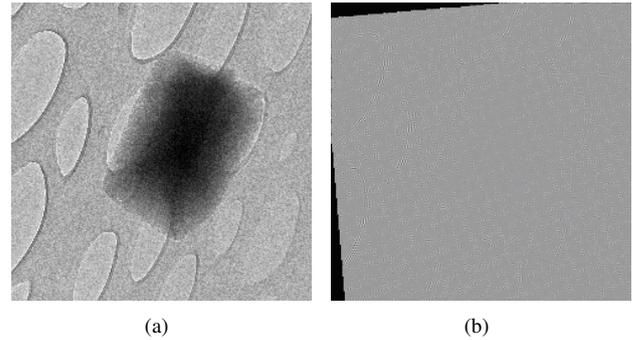


Figure 4
(a) Reference image of zeolite catalyst support I_r , (b) Difference between reference image I_r and aligned image I_a .

We return to the case of TEM images: $\Delta\varphi$ and Δs are very small. We generate a series of 140 random transformations, each consisting of a variation: $\Delta u_x, \Delta u_y \in [-30, 30]$, $\Delta\varphi \in [-0.5, 0.5]$, $\Delta s \in [-0.01, 0.01]$.

We apply this transformation to I_r to create a series of test images. We then attempt to register each test image to I_r . The accuracy of the estimated translations $(\Delta u_{t,x}^*, \Delta u_{t,y}^*)$ is given by computing the mean shift error $\Delta_{\text{shift}} = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M \sqrt{(\Delta u_{t,x} - \Delta u_{t,x}^*)^2 + (\Delta u_{t,y} - \Delta u_{t,y}^*)^2}$, for the estimated rotation $(\Delta \varphi_t^*)$ and scale (Δs_t^*) : $\Delta_{\text{rotation}} = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M \sqrt{(\Delta \varphi_t - \Delta \varphi_t^*)^2}$, $\Delta_{\text{scale}} = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M \sqrt{(\Delta s_t - \Delta s_t^*)^2}$. M is the number of images. We show these values in Tab. 1.

TABLE 1

The accuracy of the estimated translations, rotations and scales.

	Δ_{shift} [pixel]	Δ_{rotation} [°]	Δ_{scale} [%]
no noise	0.187	6.7×10^{-3}	8.8×10^{-4}
Gaussian noise ($\sigma \leq 5.0$)	0.262	1.9×10^{-2}	3.4×10^{-3}

1.5.2 Noisy case

In this test, image I_r (see Fig. 5(a)) is created by applying a transformation $R_{\Delta\phi}$ to I_r (see Fig. 4(a)), with $\Delta\phi = (-5, 5, -10^\circ, -3\%)$ and adding Gaussian noise with zero mean and a standard deviation of $\sigma \leq 5.0$ pixels. The corresponding $\text{SSIM}(I_r, I_r)$ is 0.83. Once I_r and I_r have been aligned, the residual image is very satisfactory (see Fig. 4(b)), with $\text{SSIM}(I_r, I_a) = 0.97$.

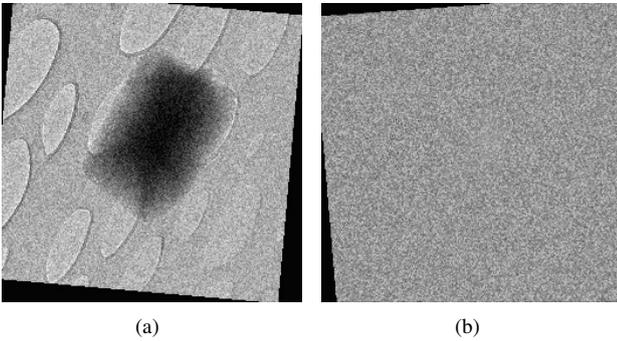


Figure 5

(a) Image to be registered, (b) Residual image between I_r and I_a .

We now add Gaussian noise ($\sigma \leq 5.0$ pixels) to each image of the series of test images, which is used in Sec. 1.5.1. The acquired images are then registered to I_r . We show the accuracy of the estimated translations, rotations and scales in Tab. 1.

1.5.3 Alignment of a series of projection

We have registered a series of TEM projections of size 256×256 of a zeolite catalyst support with our registration method (see 1.3). The series contains 142 projections;

the angle of tilt θ varies from -71° to $+70^\circ$ with a $+1^\circ$ increment. The projection which corresponds to $\theta = -71^\circ$, is presented in Fig. 4(a). We have compared the presented method to a robust standard method [18] which sequentially performs translation, rotation and scale registration. The cubic spline method [28] has been used for all interpolation procedures.

In Fig. 6, higher score is better, the symbols (■) represent SSIM factors for the alignment of each pair of images using cross-correlation based approach, while the symbols (●) and the solid line (—) represent the SSIM factors for our method based on minimizing MSE, or maximizing SSIM respectively. The presented registration method gives a higher similarity between the reference image and the registered image than the robust standard sequential approach.

We show in Fig. 7 the MSE factors corresponding to the alignment of each pair of images by different methods, it shows clearly that the proposed methods have less errors with respect to the standard method. We conclude from Fig. 6 and Fig. 7 that finding the best parameters by minimizing MSE or maximizing SSIM are essentially equivalent, while the accuracy obtained by a standard robust sequential method is lower.

For each pair of images, our method converges in 70 iterations on average, with total time ~ 6.5 second, while the other method needs 4 seconds.

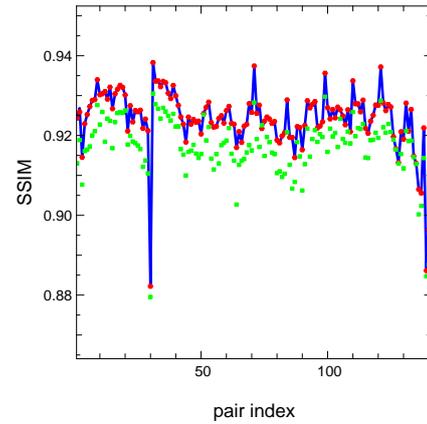


Figure 6

Values of the SSIM index for registrations obtained by standard robust sequential method (■)[18] and by the proposed method based on: minimizing MSE (●), or maximizing SSIM (—), evidencing a systematic higher scoring for our method.

2 JOINT RECONSTRUCTION AND REFINED REGISTRATION

Typically, the tomography problem is represented by the relationship between the observed image (projections measurements) and the object to be reconstructed, which can be

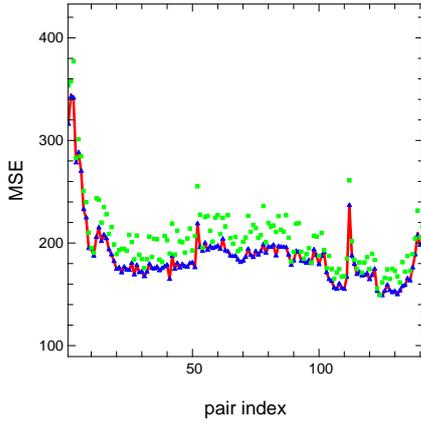


Figure 7

Values of the MSE index for registrations obtained by standard robust sequential method (■)[18] and by the proposed method based on: maximizing SSIM(▲), or minimizing MSE (—), evidencing a systematic lower error for our method.

represented by the model:

$$I_t = H_{\phi_t} \cdot x + e_t \quad (7)$$

where $I_t \in \mathbb{R}^m$ corresponds to tomographic projections, which is observed on the detector (for the t^{th} projection), $x \in \mathbb{R}^n$ are the so-called *voxels* describing the object, $H_{\phi_t} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ is a linear projection operator that characterizes how the projections are obtained from the object; the $\phi_t \in \mathbb{R}^6$ are orientation and position parameters of the object with respect to the instrument (source + detector) for the acquisition of the t^{th} projection (see Appendix 3.1). In (7), the term $e_t \in \mathbb{R}^m$ represents the errors due to the measurement noise and to the approximations of the model.

2.1 Solution of the inverse problem

The solution of the inverse problem is obtained by minimizing a cost function with respect to all voxels x and to all orientation parameters $\vartheta = \{\phi_t\}_{t=1}^M$, where M is the number of projections:

$$\{x, \vartheta\}^* = \arg \min_{x, \vartheta} f(x, \vartheta) \quad (8)$$

For statistically independent measures, the cost function is given by:

$$f(x, \vartheta) = \sum_{t=1}^M f_i(x, \phi_t) + f_{\text{prior}}(x) + \sum_{t=1}^M c_t(\phi_t) \quad (9)$$

with f_i the likelihood term of the t^{th} projection. For example, for a Gaussian noise:

$$f_i(x, \phi) = (I_t - H_{\phi} \cdot x)^{\top} \cdot W_t \cdot (I_t - H_{\phi} \cdot x) \quad (10)$$

where the weight matrix is the inverse of the covariance matrix of the noise: $W_t = \text{Cov}(e_t)^{-1}$. The function $f_{\text{prior}}(x)$ strengthens the *priori* on the voxels x ; the functions $c_t(\phi_t)$ introduce knowledge (measured or *a priori*) on the orientation parameters. A direct resolution of the problem as given by Eq. (8) is impractical because it depends on many heterogeneous parameters (voxels, translations and angles). Moreover, the cost function is multimodal. In principle, a global optimization method is necessary. We therefore split this difficult problem into sub-problems easier to solve and for which we have effective methods of resolution.

2.2 Hierarchical optimization

For given positional parameters ϑ , finding the best voxels amounts to a reconstruction formally given by:

$$x^+(\vartheta) = \arg \min_x f(x, \vartheta) \quad (11)$$

By plugging this solution into the cost function, we obtain a criterion depending only on ϑ :

$$f^+(\vartheta) = f(x^+(\vartheta), \vartheta) \quad (12)$$

The best positioning parameters are then obtained by solving an optimization problem of smaller size:

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta} f^+(\vartheta) \quad (13)$$

The solution of the global problem is then given by:

$$\{x, \vartheta\}^* = \{x^+(\vartheta^*), \vartheta^*\} \quad (14)$$

The reconstruction step, given by Eq. (11), can be performed by an existing algorithm such as filtered backprojection (FBP) or by an algebraic reconstruction method from the pre-aligned projections (see 1.3). However, the hierarchical optimization method is computationally too expensive to be applied directly. To accelerate the process, we use an alternating optimization approach (see 2.3) which can however be sub-optimal compared to a hierarchical optimization.

2.3 Alternating optimization

This method alternately estimates the voxels x for given positioning parameters ϑ and then estimates the parameters ϑ for given voxels x . This amounts to alternately perform volume reconstruction, Eq. (11), and registration. As the voxels are considered fixed during the registration stage, each image can be registered independently (in parallel). In addition (see Appendix 3.1), the alignment of a projection can be done in a rather fast way by a re-interpolation of the projection model.

1. **Initialization.** Choose initial orientation parameters $\vartheta^{[0]}$ and let $k = 0$.
2. **Reconstruction.** Estimate the voxels given the positioning parameters $\vartheta^{[k]}$:

$$x^{[k+1]} = \arg \min_x f(x, \vartheta^{[k]}) \quad (15)$$

3. **Alignment.** For each projection, seek the best positioning parameters, with fixed voxels $x^{[k+1]}$:

$$\vartheta^{[k+1]} = \arg \min_{\vartheta} f(x^{[k+1]}, \vartheta)$$

For a separable cost function f like the one in Eq. (9), the parameters ϕ_t associated with each projection are determined independently (that is, in parallel):

$$\phi_t^{[k+1]} = \arg \min_{\phi_t} f_t(x, \phi_t) + c_t(\phi_t), \quad (16)$$

Results are aggregated into:

$$\vartheta^{[k+1]} = \left\{ \phi_t^{[k+1]} \right\}_{t=1}^M.$$

4. **Convergence test.** If the method has converged (e.g., the maximum magnitude of the translation alignment parameters is less than 1.0 pixels for two consecutive iterations), stop the iterations, otherwise increment k and return to step 2.

2.4 Results

In this section, we describe experimental results on the testing of our method using two data sets: a synthetic generated data, and some series of TEM projections of standard zeolite powder. The computation time required for alternating optimization process depending separately on the time needed by the registration and the time spent for a reconstruction.

2.4.1 Algorithm testing with simulation data

We suppose that we want to reconstruct one nanoparticle that has a single composition, embedded in a homogeneous support. Fig. 8(a) shows a cross-section of the sample, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage. The series contains 142 simulated projections (256×256 pixels²) are computed from -71° to $+70^\circ$, using angular steps of $+1^\circ$. For simulation the misaligned images, due to the displacements of the sample, each image in the series is randomly transformed: horizontal and vertical shifts amount of at most $\pm 30\%$ of image dimensions, slightly rotations (does not exceed $\pm 0.5^\circ$) and small magnification changes (in the range $\pm 1.0\%$). To make the simulation more realistic, Gaussian noise with zero mean and a standard deviation of $\sigma \leq 5.0$ pixels is added to each of the projection images.

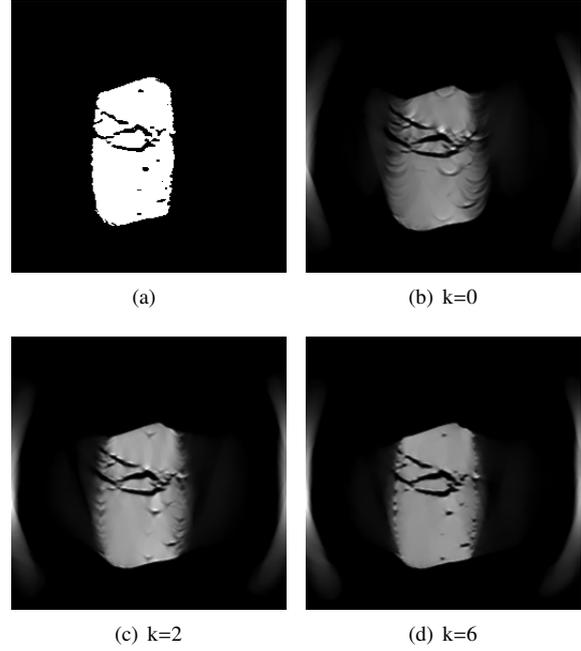


Figure 8

(a) A cross-section of the original phantom, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage. (b-d) A cross-section of reconstructed volume using different numbers of iterations of refined registration process.

The coarse alignment process (see Sec. 1.5.3) is applied on the simulation projection images. The aim is to reduce the strong shifts. From these pre-aligned projections, a first reconstructed volume is obtained by minimizing Eq.15 with a Quasi-Newton optimization algorithm: the limited memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (L-BFGS) method, combined with total-variation regularization [30]. We use a numerical model of projection (projector) based on cubic B-splines[31], which provides much less approximation errors than the distance driven projector [32].

Fig. 8(b) shows a cross-section of the reconstructed volume corresponding to the cross-section shown in Fig. 8(a). The shape of the reconstructed particle is clearly distorted, due to the accumulation of errors in the coarse alignment process. This reconstructed volume is used to calculate the simulated views, which are then considered as reference images, that are matched with each initial projection. This process is repeated, the quality of the reconstruction has improved considerably in few iterations. Fig. 8(c) shows the cross-section of the reconstruction using 2 iterations of refined registration process. It is already very clear that the quality of the reconstruction has improved considerably. Only 6 iterations are necessary to archive a good reconstruction (see Fig. 8(d)), which is nearly perfect with respect to the original phantom. The quality improvement of the reconstructed volume at different iterations of alignment pro-

cess is shown in Fig.9.

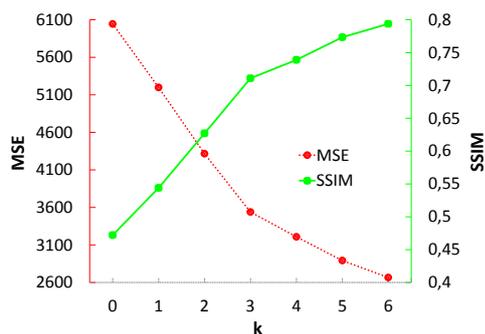


Figure 9

Values of the SSIM index and MSE between the original phantom and the reconstructed volume at different iterations.

In the current implementation of the code, the time spent for a reconstruction by optimization using L-BFGS, is about 3 hours for a volume of $256 \times 256 \times 256$ voxels. This time can be reduced considerably by performing the reconstruction step by a standard reconstruction method as FBP, SIRT, ART, etc.; however, these methods can not perform regularized reconstruction, which is necessary to reduce artifacts due to missing projections (limited angle geometry).

2.4.2 Algorithm testing with experimental data

In order to better understand the porosity of the zeolite powder (CBV712 from Zeolyst), we used electron tomography to evaluate the full 3D structure of the material. The tilt-series for the tomographic reconstruction was acquired on a TEM JEOL 2100F.

The first series of projections contains 142 images of a zeolite powder, which were acquired semi-automatically over a tilt range varying from -71° to $+70^\circ$. The projection which corresponds to $\theta = -71^\circ$, is shown in Fig. 4(a). The series of images were aligned using our proposed approach.

We show in Fig. 10(a) and Fig. 10(b) the isosurfaces of the final reconstruction, which is obtained after 6 iterations of the joint reconstruction and refined registration process. Fig. 10(c) shows a cross-section in the yz direction of the final reconstruction, which shows that even small details are reconstructed accurately.

Our second test used an other series of a zeolite powder, which contains 141 images from -71° to $+69^\circ$. The projections recorded at $\theta = -71^\circ, 20^\circ$ are shown in Fig. 11(a), 11(b). We apply the same process of alignment. Fig. 11(c), 11(d) illustrate the isosurfaces of the final reconstruction obtained after 6 steps of iterations of registration process.

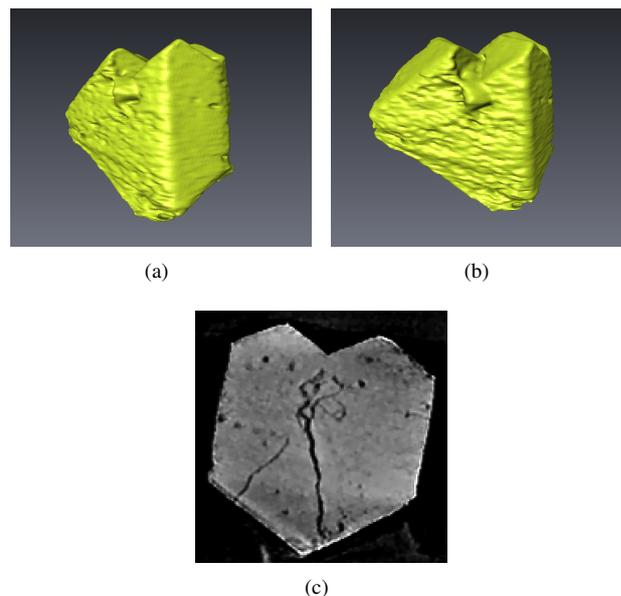


Figure 10

(a-b) The isosurfaces of the final reconstruction obtained with the complete procedure with 256×256 TEM projections from different viewing angles. (c) One slice in the yz direction of the reconstruction results.

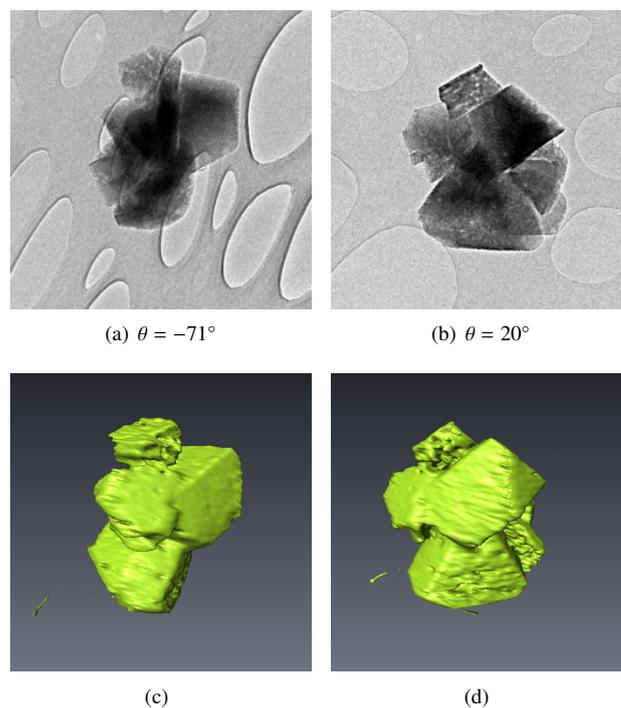


Figure 11

(a,b) The real projections. (c,d) The isosurfaces of the final reconstruction obtained after 6 steps of iterations of the joint reconstruction and refined registration process.

CONCLUSION

An automatic robust registration method using an inverse problem approach has been presented. Our experimental results demonstrate that the proposed method yields accurate translation, rotation and scaling parameters for electron tomographic series without needing fiducial markers.

We are now working on a strategy to cope with missing projections by taking into account priors such as having a piecewise constant object with a very limited number of phases. This strategy will be integrated in the alternating optimization process to improve the quality of the reconstructed object in spite of instrumental jitter.

3 APPENDIX

3.1 Alignment of a projection

For a given projection, there are 6 orientation parameters $\phi_t \in \mathbb{R}^6$: three translational ones: X_t, Y_t, Z_t , and three rotational ones corresponding to three Euler angles $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$. Since the considered system performs parallel projections, by an adequate choice of the axes (two axes OX, OY aligned with the pixels of the detector and the third one, OZ in the normal direction), 2 terms of translation X_t, Y_t correspond to a translation of the projection; the third one, Z_t , has an impact on the magnification of the projection; the angle of rotation α_t (around OZ) corresponds to a simple rotation of the projection in the detector plane (see Fig. 12).

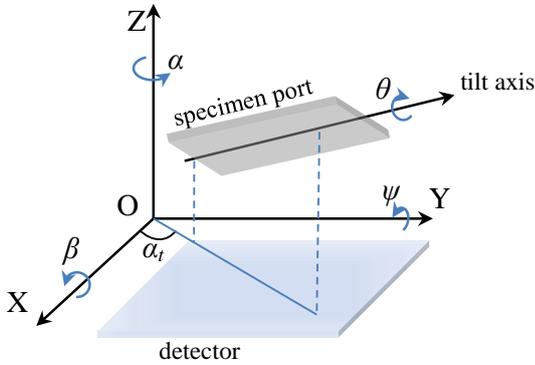


Figure 12

Tilt geometry: (X, Y, Z) coordinate system fixed. OZ is the optical axis. The OX, OY axes are parallel to the detector pixel rows and columns. The specimen port tilts about the tilt axis and angle θ . Due to mechanical imprecision, the specimen port may be shifted about X_t, Y_t, Z_t , and slightly tilted about $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$ (along/around OX, OY, OZ respectively).

For 4 orientation parameters $(X_t, Y_t, Z_t, \alpha_t)$, the effects on projection can be obtained by simple interpolation. It remains two rotational angles β_t, ψ_t whose variation respectively around OY, OZ requires to recalculate the projection

of the voxels. In mathematical terms:

$$H_{\phi_t + \Delta\phi_t} \cdot x \approx R_{\Delta\phi_t} \cdot H_{\phi_t} \cdot x$$

where R is a linear transformation similar to a 2D interpolation (translation, rotation and magnification) for a variation of parameters $\Delta\phi_t \in \mathbb{S}(\phi_t)$ belonging to some subspace $\mathbb{S}(\phi_t) \in \mathbb{R}^4$. This property should be exploited to accelerate the calculations. Otherwise, the effects of translation on the projection can be calculated for all possible translations with a pixel size resolution using a small number of FFT [33].

3.2 The relationship between the presented method and the maximum correlation

In order to keep things simple, we deal here with the case where two images I_1 and I_2 are misaligned only along a single dimension (Ox). In such a case, the cost function is reduced to:

$$E(\Delta u, a) = \sum_{i=1}^N w_i \cdot [I_1(u_i) - a \cdot I_2(u_i - \Delta u)]^2$$

N is the number of pixels in the domain of interest (see Fig. 2), Δu the shift in position, a is a factor taking into account the attenuation, and w is a weighting function (which may be a function of u_i and $u_i - \Delta u$ the positions of the pixels that correspond in the two images). Minimizing $E(\Delta u, a)$ with respect to a :

$$\frac{\partial E(\Delta u, a)}{\partial a} = 0$$

we obtain:

$$a^+(\Delta u) = \frac{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u)}{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_2(u_i - \Delta u)^2}$$

It is a function of Δu ; by replacing in $E(\Delta u, a)$ we obtain a criterion which depends only on Δu :

$$E^+(\Delta u) = E(\Delta u, a^+(\Delta u)) = \sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i)^2 - Q(\Delta u)$$

with :

$$Q(\Delta u) = \frac{\left[\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u) \right]^2}{\sum_{i=1}^N w_i \cdot I_2(u_i - \Delta u)^2}$$

As the first term of $E^+(\Delta u)$ does not depend on Δu , $E^+(\Delta u)$ is minimized with respect to Δu if and only if $Q(\Delta u)$ is maximized.

Under the following assumptions:

1. the weights are constant (i.e. the noise level is the same for all pixels),

2. the denominator of $Q(\Delta u)$ is almost the same whatever Δu ,
3. and there is no contrast inversion between the two images (i.e. $a^+(\Delta u) > 0$),

the maximization of $Q(\Delta u)$ is equivalent to maximizing:

$$C(\Delta u) = \sum_{i=1}^N I_1(u_i) \cdot I_2(u_i - \Delta u)$$

(the numerator of $a^+(\Delta x)$ under the above assumptions) which is nothing else than the cross-correlation between the two images. While the 3rd assumption is reasonable, the two others are more obvious: the noise level may depend on the pixel and, if there are any structures in the images, the denominator of $Q(\Delta u)$ depend on Δu . Note that, if there are no such structures, registration is worthless so, at least, the 2nd assumption does not apply.

In fact, $E(\Delta u, a)$ can be seen as the opposite of the log-likelihood of the data given the model assuming Gaussian noise (not necessarily uniform). Thus, our approach derives from the maximum likelihood method by making less approximations (in particular the second one) than the maximum correlation method. For this reason, our method is likely to be superior.

REFERENCES

- 1 Ersen O., Hirlimann C., Drillon M., Werckmann J., Tihay F., Pham-Huu C., Crucifix C., and Schultz P. (2007) 3D-TEM characterization of nanometric objects. *Solid State Sciences*, **9**, 12, 1088–1098.
- 2 Kak A.C. and Slaney M. (1988) Principles of computerized tomographic imaging. *Engineering*, **33**, 1, 327.
- 3 Gordon R., Bender R., and Herman G.T. (1970) Algebraic reconstruction techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and x-ray photography. *Journal of Theoretical Biology*, **29**, 3, 471–481.
- 4 Andersen A.H. and Kak A.C. (1984) Simultaneous algebraic reconstruction technique (SART): a superior implementation of the art algorithm. *Ultrasonic Imaging*, **6**, 1, 81–94.
- 5 Jiang M. and Wang G. (2003) Convergence of the simultaneous algebraic reconstruction technique (SART). *IEEE Transactions on Image Processing*, **12**, 8, 957–61.
- 6 Crowther R.A. (1971) Procedures for three-dimensional reconstruction of spherical viruses by Fourier synthesis from electron micrographs. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London - Series B: Biological Sciences*, **261**, 837, 221–230.
- 7 Potts D. and Steid G. (2000) New Fourier reconstruction algorithms for computerized tomography. *Wavelet Applications in Signal and Image Processing VIII*, **4119**, 1, 13–23. SPIE.
- 8 Frank J. (2006) *Electron tomography: methods for three-dimensional visualization of structures in the cell*. Springer.
- 9 Ress D., Harlow M.L., Schwarz M., Marshall R.M., and McMahan U.J. (1999) Automatic acquisition of fiducial markers and alignment of images in tilt series for electron tomography. *Journal of Electron Microscopy*, **48**, 3, 277–287.
- 10 Brandt S.S., Heikkonen J., and Engelhardt P. (2001) Multi-phase method for automatic alignment of transmission electron microscope images using markers. *Journal of Structural Biology*, **133**, 3, 201–213.
- 11 Amat F., Moussavi F., Comolli L.R., Elidan G., Downing K.H., and Horowitz M. (2008) Markov random field based automatic image alignment for electron tomography. *Journal of Structural Biology*, **161**, 3, 260–275.
- 12 Brandt S.S., Heikkonen J., and Engelhardt P. (2001) Automatic alignment of transmission electron microscope tilt series without fiducial markers. *Journal of Structural Biology*, **136**, 3, 201–213.
- 13 Brandt S.S. and Ziese U. (2006) Automatic TEM image alignment by trifocal geometry. *Journal of Microscopy*, **222**, 1–14.
- 14 Sorzano C.O.S., Messaoudi C., Eibauer M., Bilbao-Castro J., Hegerl R., Nickell S., Marco S., and Carazo J. (2009) Marker-free image registration of electron tomography tilt-series. *BMC Bioinformatics*, **10**, 1, 124.
- 15 Frank J. and McEwen B.F. (1992) Alignment by cross-correlation. *Electron Tomography Threedimensional Imaging with the Transmission Electron Microscope*, 205–213. Plenum Press, New York.
- 16 Gratadour D., Mugnier L.M., and Rouan D. (2005) Sub-pixel image registration with a maximum likelihood estimator application to the first adaptive optics observations of arp 220 in the L band. *Astronomy & Astrophysics*, **365**, 357–365.
- 17 Liu Y., Penczek P.A., McEwen B.F., and Frank J. (1995) A marker-free alignment method for electron tomography. *Ultramicroscopy*, **58**, 3–4, 393–402.
- 18 Tzimiropoulos G., Argyriou V., Zafeiriou S., and Sathaki T. (2010) Robust FFT-based scale-invariant image registration with image gradients. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **32**, 10, 1899–1906.
- 19 Cop M. and Dengler J. (1990) A multiresolution approach to the 3D reconstruction of a 50s ribosome from an EM-tilt series solving the alignment problem without gold particles. *Proceedings 10th International Conference on Pattern Recognition*.
- 20 Owen C.H., and Landis W.J. (1996) Alignment of electron tomographic series by correlation without the use of gold particles. *Ultramicroscopy*, **63**, 1, 27–38.
- 21 Winkler H., and Taylor K.A. (2006) Accurate marker-free alignment with simultaneous geometry determination and reconstruction of tilt series in electron tomography. *Ultramicroscopy*, **106**, 3, 240–254.
- 22 Houben L., and Bar Sadan M. (2011) Refinement procedure for the image alignment in high-resolution electron tomography. *Ultramicroscopy*, **111**, 9–10, 1512–20.
- 23 Penczek P.A., Grassucci R.A., and Frank J. (1994) The ribosome at improved resolution: new techniques for merging and orientation refinement in 3D cryo-electron microscopy of biological particles. *Ultramicroscopy*, **53**, 3, 251–270.
- 24 Yang C., Ng E.G., and Penczek P.A. (2005) Unified 3-D structure and projection orientation refinement using quasi-newton algorithm. *Journal of Structural Biology*, **149**, 1, 53–64.
- 25 Parkinson D.Y., Knoechel C., Yang C., Larabell C.A., and Le Gros M.A., (2012) Automatic alignment and reconstruction of images for soft X-ray tomography. *Journal of Structural Biology*, **177**, 2, 259–66.
- 26 Nelder J.A. and Mead R. (1965) A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*, **7**, 4, 308–313.

- 27 Lagarias J.C., Reeds J.A., Wright M.H., and Wright P.E. (1998) Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions. *SIAM Journal on Optimization*, **9**, 1, 112.
- 28 Thevenaz P., Blu T., and Unser M. (2000) Interpolation revisited. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, **19**, 7, 739–758.
- 29 Wang Z., Bovik A.C., Sheikh H.R., and Simoncelli E.P. (2004) Image quality assessment: from error visibility to structural similarity. *IEEE Transactions on Image Processing*, **13**, 4, 600–612.
- 30 Rudin L.I., Osher S., and Fatemi E. (1992) Nonlinear total variation based noise removal algorithms. *Physica D: Nonlinear Phenomena*.
- 31 Momey F., Denis L., Mennessier C., Thiébaud E., Becker J.M., and Desbat L. (2011) A new representation and projection model for tomography, based on separable B-splines. *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, 2602–2609.
- 32 DeMan B. and Basu S. (2004) Distance driven projection and backprojection in three dimensions. *Physics in Medicine and Biology*, **49**, 11, 2463–2475.
- 33 Soulez F., Denis L., Fournier C., Thiébaud E., and Goepfert C. (2007) Inverse-problem approach for particle digital holography: accurate location based on local optimization. *Journal of the Optical Society of America A*, **24**, 4, 1164–1171.

*The date of receipt and acceptance
will be inserted by the editor.*

Copyright © 2010 IFPEN Energies nouvelles

Permission to make digital or hard copies of part or all of this work for personal or classroom use is granted without fee provided that copies are not made or distributed for profit or commercial advantage and that copies bear this notice and the full citation on the first page. Copyrights for components of this work owned by others than IFP Energies nouvelles must be honored. Abstracting with credit is permitted. To copy otherwise, to republish, to post on servers, or to redistribute to lists, requires prior specific permission and/or a fee: Request permission from Documentation, IFP Energies nouvelles, fax. +33 1 47 52 70 78, or revueogst@ifpen.fr.

Robust registration of electron tomography projections without fiducial markers

Viet-Dung Tran^{a,c}, Maxime Moreaud^a, Éric Thiébaud^b, Loïc Denis^c and Jean-Marie Becker^c

^aIFP Energies nouvelles, Technology, Computer Science and Applied Mathematics Division, BP 3, 69360 Solaize - France;

^bObservatoire de Lyon, CRAL CNRS UMR 5574, Université de Lyon, France;

^cLaboratoire Hubert Curien, UMR CNRS 5516, Université de Saint-Etienne, France

ABSTRACT

A major issue in electron tomography is the misalignment of the projections contributing to the reconstruction. The current alignment techniques currently use fiducial markers such as gold particles. When the use of markers is not possible, the accurate alignment of the projections is a challenge. We describe a new method for the alignment of transmission electron microscopy (TEM) images series without the need of fiducial markers. The proposed approach is composed of two steps. The first step consists of an initial alignment process, which relies on the minimization of a cost function based on robust statistics measuring the similarity of a projection to its previous projections in the series. It reduces strong shifts resulting from the acquisition between successive projections. The second step aligns the projections finely. The issue is formalized as an inverse problem. The pre-registered projections are used to initialize an iterative alignment-refinement process which alternates between (i) volume reconstructions and (ii) registrations of measured projections onto simulated projections computed from the volume reconstructed in (i). The accuracy of our method is very satisfying; we illustrate it on simulated data and real projections of different zeolite supports catalyst.

Keywords: Robust registration; electron tomography; image reconstruction; inverse problem.

1. INTRODUCTION

Electron tomography is a powerful characterization technique for the reconstruction of the 3D nanoscale structure of objects from a series of 2D TEM projections acquired by tilting the specimen at various angles (usually in the range $\pm 70^\circ$ with a 1° step) around an axis perpendicular to the electron beam (see Fig. 1).

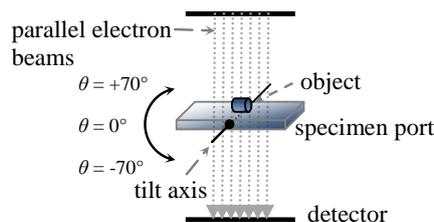


Figure 1. Data collection geometry in 3D reconstruction by TEM.

Reconstruction techniques¹ require a precise alignment of the different projections. Because of mechanical imprecision and magnetic lenses defocus, neighboring projections may differ by a shift, a slight tilt and a change in magnification.² Currently, the most common alignment technique uses markers' tracking.^{3,4} This method uses gold nanoparticles spread onto the surface of the specimen prior to imaging; these particles can be localized very accurately, even at high tilt angles, thanks to their round shape and their sharp contrast. Alignment with markers has two advantages. First, since markers positions measured over the full range of tilt angles are fit to a single set of projection equations, the alignment of the series of projections is guaranteed to be globally consistent.

Further author information: viet-dung.tran@ifpen.fr

Secondly, the method can be adapted to correct anisotropic and non-uniform changes of the specimen during the tilt series.² However, the fiducial markers method has several practical disadvantages. It can be difficult to obtain an appropriate distribution of markers on the specimen, i.e. a distribution as homogeneous as possible, a necessary condition for proper alignment. Moreover for high-resolution reconstruction (e.g. reconstructed volume with voxels $\leq 1nm^3$), the size of gold nanoparticles (approximately $5nm$ in diameter) becomes troublesome by masking an important part of the body of the reconstruction. Another drawback of markers is the need to track their positions accurately, which can be a very costly step. Certain approaches^{5,6} are based on points of interest automatically extracted from the images; these points permit to deduce the alignment parameters.

We deal here with the case where no such markers are used for alignment. This case can be handled by cross-correlation methods.⁷⁻¹⁰ The principle of these techniques is based on the alignment between two images. Precisely, the first image of a series of projections is chosen as the reference image, then each image is aligned with the previous image in the series, thereby sequentially compensating image shifts throughout the entire series. Moreover, the accumulation of errors in the estimated parameters is a disadvantage of these methods based on pairwise alignment of images. To overcome this defect, a 3D model-based method has been proposed by Dengler,¹¹ in which the alignment parameters were refined by switching between a reconstruction step and an alignment step between the modeled projections and real projections. This method has been developed by several authors.¹²⁻¹⁴ In cryoEM for the biological sciences, the 3D model-based method is known as a projection matching,^{15,16} with excellent results in X-ray tomography.¹⁷

In this paper, we propose a new method for the alignment of TEM image series without the need for fiducial markers; this method recovers in an accurate manner the changes in translation, rotation and scaling parameters. The alignment procedure consists of two stages:

- First, we use an optimization approach for projections' alignment. The aim is to reduce the strong shifts, due to the acquisition between successive projections, and to facilitate the following step.
- The pre-aligned projections are then used to initialize an iterative procedure which simultaneously restores the 3-D object and accurately aligns the projections.

2. METHOD

2.1 Initial alignment

2.1.1 Alignment between two images

Prior to the general case (global alignment of M images), one needs to build an alignment method for 2 images. Four transformation parameters are required: horizontal and vertical translations, rotation and scaling. These parameters define how an image I_t to be registered is transformed into a reference image I_r . We propose a method that is more robust than cross-correlation based approaches.¹⁸ This method determines the parameters of the geometrical transformations by minimizing the mean squared error (MSE) between I_r and I_t :

$$\Delta\phi^* = \arg \min_{\Delta\phi} E(\Delta\phi) \quad (1)$$

with:

$$E(\Delta\phi) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [I_r(u_i) - (R_{\Delta\phi} \cdot I_t)(u_i)]^2 \quad (2)$$

The u_i are the pixels' coordinates, $R_{\Delta\phi}$ is a linear operator which interpolates its argument in order to apply a geometrical transformation of the image specified by the parameters $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$ corresponding respectively to the horizontal and vertical shifts of a translation, the angle of rotation and the magnification scale (see Sec. 2.1.2). N is the number of pixels in the domain of interest (see Fig. 2), which depends on $\Delta\phi$. In our application, $|\Delta u_x| \leq W/2$ and $|\Delta u_y| \leq H/2$ with W, H the width and height of the image, $\Delta\varphi$ does not exceed $\pm 2^\circ$ and Δs is in the range $\pm 0.5\%$.

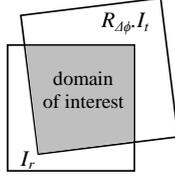


Figure 2. Domain of interest: intersection of two images.

Eq. (1) is solved using the Nelder & Mead simplex algorithm,¹⁹ implemented as described in.²⁰ This derivative-free optimization method evaluates iteratively $E(\Delta\phi)$ until a minimum is found. By changing the definition of $E(\Delta\phi)$, our approach can be readily adapted to a large class of similar problems. The initialization step deserves some explanations. The shifts $\Delta u_x, \Delta u_y$ are pre-estimated by means of cross-correlation. The rotation and scale parameters between two successive TEM images being very small, homogeneous the optimization is started with $\Delta\varphi^{[0]} = 0, \Delta s^{[0]} = 0$ (neither rotation nor scaling). Note that, since $R_{\Delta\phi}$ is an interpolation operator which continuously depends on the parameters $\Delta\phi$, minimizing $E(\Delta\phi)$ achieves sub-pixel accuracy for the shift parameters.

2.1.2 Image transformation

The linear operator $R_{\Delta\phi}$ in Eq. (2) corresponds to the change of coordinates given by the homogeneous matrix:

$$M_{\Delta\phi} = \begin{bmatrix} (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & (s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & \Delta u_x \\ -(s + \Delta s) \sin \Delta\varphi & (s + \Delta s) \cos \Delta\varphi & \Delta u_y \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

which depends on $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$. The relation $v = M_{\Delta\phi} \cdot u$ changes the coordinates $u = (u_x, u_y, 1)^T$ in the initial image into the coordinates $v = (v_x, v_y, 1)^T$ in the transformed image. The transform $R_{\Delta\phi}$ is an interpolation operator. On the basis of many experiments, we have found that cubic B-spline interpolation²¹ gives better results than nearest neighbors or linear interpolation methods.

2.1.3 Alignment of a series of projections

We now turn to the case of a series of projections. The first image is chosen as the reference image. By applying our alignment method for two images, each image is aligned with the previous image in the series, thereby sequentially compensating image shifts throughout the entire series. This method minimizes the following cost function:

$$E(\Phi) = \sum_{t=1}^{M-1} \left(\frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} [I_t(u_i) - (R_{\Delta\phi_t} \cdot I_{t+1})(u_i)]^2 \right) \quad (4)$$

where M is the number of images in the sequence, N_t is the number of pixels in the domain of interest between I_t and I_{t+1} , Φ is a set of transformation parameters's vectors:

$$\Phi = \{\Delta\phi_t\}_{t=1}^{M-1} \quad (5)$$

The form of function (4) allows a parallel computation of the parameters $\Delta\phi_t = (\Delta u_{t,x}, \Delta u_{t,y}, \Delta\varphi_t, \Delta s_t)$ associated with each pair of images. Fig. 3 shows the relation between the transformation parameters in a series of images. $\gamma_t = (u_{t,x}, u_{t,y}, \varphi_t, s_t)$, $t = 1, \dots, M-1$ are the pseudo-transformation parameters between images 2, .. M and the first (reference) image. The components of γ_t are:

$$\begin{cases} u_{t,x} &= \text{Coeff. (1,3) of } A_t \\ u_{t,y} &= \text{Coeff. (2,3) of } A_t \\ \varphi_t &= \sum_{i=1}^t \Delta\varphi_i \\ s_t &= \prod_{i=1}^t \Delta s_i \end{cases} \quad (6)$$

with $A_t = R_{\Delta\phi_t} \cdot R_{\Delta\phi_{t-1}} \cdots R_{\Delta\phi_1}$.

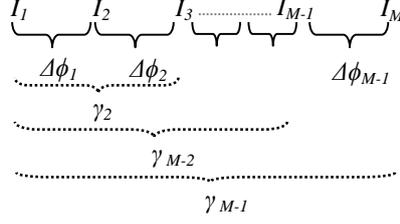


Figure 3. Correspondence between the transformation parameters of the image series.

2.2 Joint reconstruction and refined registration

Generally speaking, a tomographic issue is an attempt to match an observed image (projections measurements) and an object to be reconstructed; such an issue can be represented by the following relationship:

$$I_t = H_{\phi_t} \cdot x + e_t \quad (7)$$

where $I_t \in \mathbb{R}^m$ corresponds to tomographic projections, as observed on the detector (for the t^{th} projection), $x \in \mathbb{R}^n$ stands for the *voxels* belonging to the object, $H_{\phi_t} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ is a linear projection operator that characterizes how the projections are obtained from the object; The term $e_t \in \mathbb{R}^m$ represents the errors due to the measurement noise and to the approximations of the model.

The t^{th} projection is fully characterized by 6 orientation parameters $\phi_t \in \mathbb{R}^6$ with respect to the instrument (source + detector): three translational ones: X_t, Y_t, Z_t , and three rotational ones corresponding to three Euler angles $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$ (see Fig. 4). Since the considered system performs parallel projections, by an adequate choice of the axes (two axes OX, OY aligned with the pixels of the detector and the third one, OZ in the normal direction), 2 terms of translation X_t, Y_t correspond to a translation of the projection; the third one, Z_t , has an impact on the magnification of the projection; the angle of rotation α_t (around OZ) corresponds to a simple rotation of the projection in the detector plane.

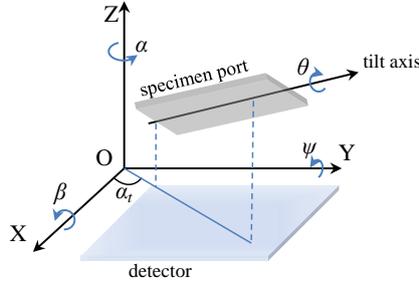


Figure 4. Tilt geometry: (X, Y, Z) fixed coordinate system. OZ is the optical axis. The OX, OY axes are parallel to the detector pixel rows and columns. The specimen port tilts around the tilt axis and angle θ . Due to mechanical imprecision, the specimen port may be shifted about X_t, Y_t, Z_t , and slightly tilted about $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$ (along/around OX, OY, OZ respectively).

2.2.1 Solution of the inverse problem

The solution of the inverse problem is obtained by minimizing a cost function with respect to all voxels x and to all orientation parameters $\vartheta = \{\phi_t\}_{t=1}^M$, where M is the number of projections:

$$\{x, \vartheta\}^* = \arg \min_{x, \vartheta} f(x, \vartheta) \quad (8)$$

For statistically independent measures, the cost function is given by:

$$f(x, \vartheta) = \sum_{t=1}^M f_t(x, \phi_t) + f_{\text{prior}}(x) + \sum_{t=1}^M c_t(\phi_t) \quad (9)$$

with f_t the likelihood term of the t^{th} projection. For example, for a Gaussian noise:

$$f_t(x, \phi) = (I_t - H_\phi \cdot x)^\top \cdot W_t \cdot (I_t - H_\phi \cdot x) \quad (10)$$

where the weight matrix is the inverse of the covariance matrix of the noise: $W_t = \text{Cov}(e_t)^{-1}$. The function $f_{\text{prior}}(x)$ strengthens the *a priori* on the voxels x ; functions $c_t(\phi_t)$ introduce knowledge (measured or *a priori*) on the orientation parameters. A direct resolution of the problem as given by Eq. (8) is intractable because it depends on too many heterogeneous parameters (voxels, translations and angles). Moreover, the cost function is multimodal. In principle, a global optimization method is necessary. We therefore split this difficult problem into sub-problems with effective methods of resolution.

2.2.2 Hierarchical optimization

For given positional parameters ϑ , finding the best voxels amounts to a reconstruction formally given by:

$$x^+(\vartheta) = \arg \min_x f(x, \vartheta) \quad (11)$$

By plugging this solution into the cost function, we obtain a criterion depending only on ϑ :

$$f^+(\vartheta) = f(x^+(\vartheta), \vartheta) \quad (12)$$

The best positioning parameters are then obtained by solving a smaller size optimization problem:

$$\vartheta^* = \arg \min_{\vartheta} f^+(\vartheta) \quad (13)$$

The solution of the global problem is then given by:

$$\{x, \vartheta\}^* = \{x^+(\vartheta^*), \vartheta^*\} \quad (14)$$

The reconstruction step, given by Eq. (11), can be performed by an existing algorithm such as filtered backprojection (FBP) or by an algebraic reconstruction method from the pre-aligned projections (see 2.1.3). However, the hierarchical optimization method is computationally too expensive to be applied directly. We accelerate the process, by using an alternating optimization approach (see 2.2.3) which can however be sub-optimal compared to a hierarchical optimization.

2.2.3 Alternating optimization

This method alternately estimates the voxels x for given positioning parameters ϑ and then estimates the parameters ϑ for given voxels x . This amounts to alternately perform volume reconstruction, Eq. (11), and registration. As the voxels are considered fixed during the registration stage, each image can be registered independently (in parallel).

1. **Initialization.** Choose initial orientation parameters $\vartheta^{[0]}$ and let $k = 0$.
2. **Reconstruction.** Estimate the voxels, given the positioning parameters $\vartheta^{[k]}$:

$$x^{[k+1]} = \arg \min_x f(x, \vartheta^{[k]}) \quad (15)$$

3. **Alignment.** For each projection, look for the best positioning parameters, with fixed voxels $x^{[k+1]}$:

$$\vartheta^{[k+1]} = \arg \min_{\vartheta} f(x^{[k+1]}, \vartheta)$$

For a separable cost function f like the one in Eq. (9), the parameters ϕ_t associated with each projection are determined independently (that is, in parallel):

$$\phi_t^{[k+1]} = \arg \min_{\phi_t} f_t(x, \phi_t) + c_t(\phi_t), \quad (16)$$

Results are aggregated into:

$$\vartheta^{[k+1]} = \left\{ \phi_t^{[k+1]} \right\}_{t=1}^M.$$

4. **Convergence test.** If the maximum magnitude of the translation alignment parameters is less than 1.0 pixels for two consecutive iterations, stop the iterations, otherwise increment k and return to step 2.

3. RESULTS

In this section, we describe experimental results on the testing of our method using two data sets: a synthetic generated data, and some series of TEM projections of standard zeolite powder. The computation time required for alternating optimization process depending separately on the time needed by the registration and the time spent for a reconstruction. Our algorithm has been implemented and tested with development toolkit Yorick (<http://yorick.sourceforge.net/>) on 2.6-GHz Intel Core 2 Duo machine.

3.1 Algorithm testing with simulated data

Let us assume that we want to reconstruct a single nanoparticle that has a single composition, embedded in a homogeneous support. Fig. 5(a) shows a cross-section of such as a sample, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage. The series contains 142 simulated projections (256×256 pixels²) corresponding to angles ranging from -71° to $+70^\circ$, with 1° angular steps. The simulation of the misaligned images, due to the displacements of the sample, is obtained by a random transformation for each image in the series: horizontal and vertical shifts in a range of at most $\pm 30\%$ of image dimensions, small rotations (less than $\pm 0.5^\circ$) and small magnification changes (in the range $\pm 1.0\%$). The simulation is made more realistic by adding a Gaussian noise with zero mean and a standard deviation of $\sigma \leq 5.0$ pixels is added to each projection image.

The coarse alignment process (see Sec. 2.1.3) is applied on the simulation projection images to reduce the strong shifts. From these pre-aligned projections, a first reconstructed volume is obtained by minimizing Eq.15 with a Quasi-Newton optimization algorithm i.e., the limited memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (L-BFGS)²² method, combined with total-variation regularization.²³ An accurate numerical model of projection (projector) based on cubic B-splines,²⁴ is used, yielding much less approximation errors than standard distance driven projector.²⁵

Fig. 5(b) shows a cross-section of the reconstructed volume corresponding to the cross-section shown in Fig. 5(a). The shape of the reconstructed particle is clearly distorted, due to the accumulation of errors in the coarse alignment process. This reconstructed volume is used to calculate the simulated views. These views, now considered as reference images, are matched with each initial projection. By repeating this process a few times, the quality of the reconstruction has improved considerably. Fig. 5(c) shows the cross-section of the reconstruction using 2 iterations of refined registration process, with a large improvement in the reconstructed image. Only 6 iterations are necessary to achieve a good reconstruction (see Fig. 5(d)), which is nearly the same as the original phantom. The quality improvement of the reconstructed volume at different iterations of alignment process is shown in Fig. 6.

In the current implementation of our method, the time spent for a reconstruction by optimization using L-BFGS, is about 3 hours for a volume of $256 \times 256 \times 256$ voxels. This time can be strongly reduced by performing the reconstruction step by a standard reconstruction method as FBP, SIRT, ART, etc.; however, these methods can not perform regularized reconstruction, a necessary step in order to reduce artifacts due to missing projections (limited angle geometry).

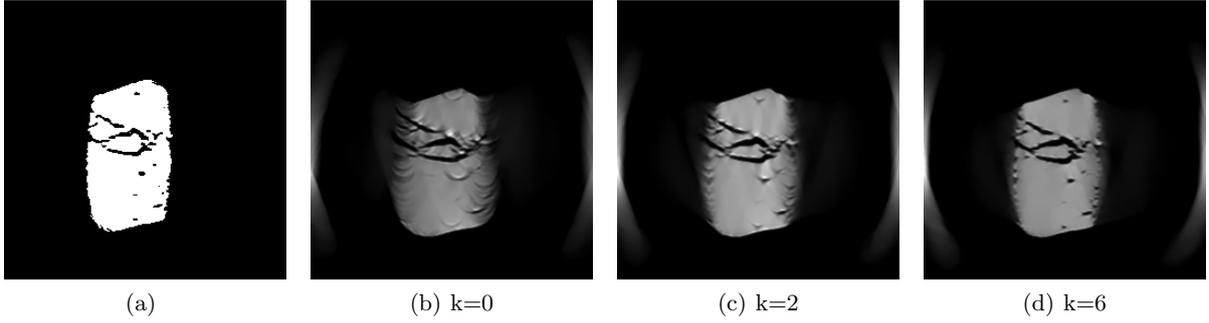


Figure 5. (a) A cross-section of the sample, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage. (b-d) A cross-section of reconstructed volume using different numbers of iterations of refined registration process.

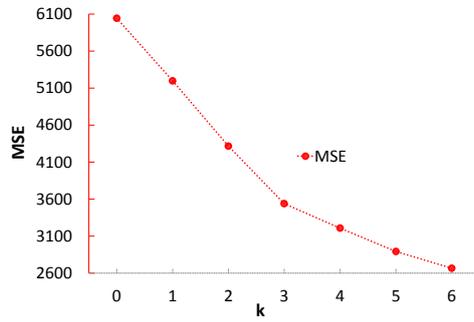


Figure 6. Values of MSE between the original phantom and the reconstructed volumes for different iterations.

3.2 Algorithm testing with experimental data

In order to better understand the porosity of the zeolite powder (CBV712 from Zeolyst), we used electron tomography to evaluate the full 3D structure of the material. The tilt-series for the tomographic reconstruction was acquired on a TEM JEOL 2100F.

The first series of projections contains 142 images of a zeolite powder, which were acquired semi-automatically over a tilt range varying from -71° to $+70^\circ$. The series of images were aligned using our proposed approach. Fig. 7(a) and Fig. 7(b) display the isosurfaces of the final reconstruction, obtained using 6 iterations of the joint reconstruction and refined registration process. Fig. 7(c) shows a cross-section in the yz direction of the final reconstruction, which shows that even small details are reconstructed accurately.

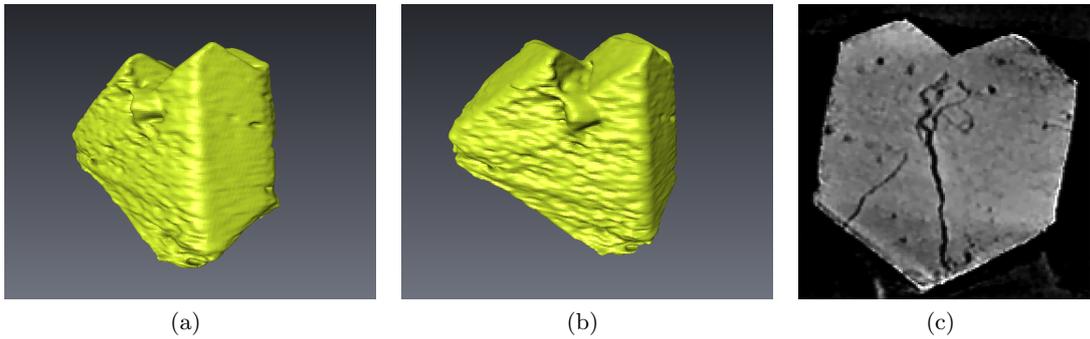


Figure 7. (a-b) The isosurfaces of the final reconstruction obtained with the complete procedure with 256×256 TEM projections from different viewing angles. (c) One slice in the yz direction of the reconstruction results.

Our second test used another series of a zeolite powder, which contains 141 images from -71° to $+69^\circ$. The

projections recorded at $\theta = -71^\circ, 20^\circ$ are shown in Fig. 8(a), 8(b). We apply the same process of alignment. Fig. 8(c), 8(d) display the isosurfaces of the final reconstruction obtained after 6 steps of iterations of registration process.

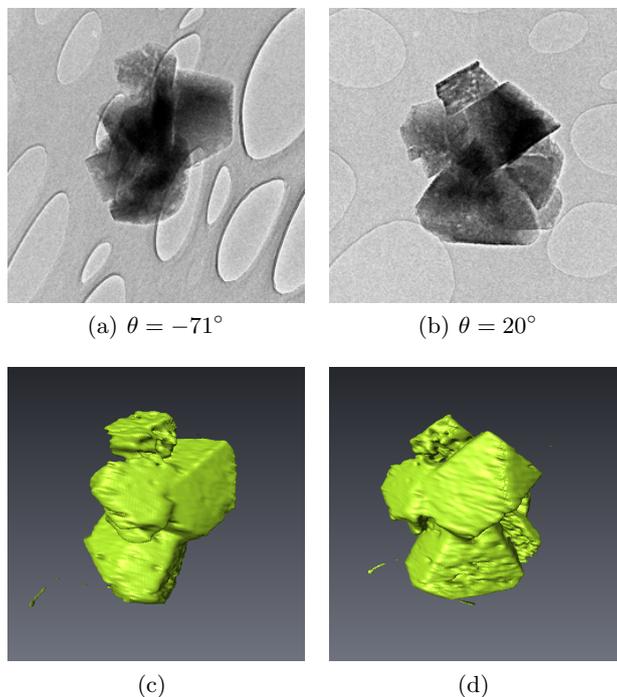


Figure 8. (a,b) The real projections. (c,d) The isosurfaces of the final reconstruction obtained after 6 steps of iterations of the joint reconstruction and refined registration process.

CONCLUSION

An automatic robust registration method using an inverse problem approach has been presented. Our experimental results demonstrate that the proposed method yields accurate translation, rotation and scaling parameters for electron tomographic series without needing fiducial markers. We are now developing a method which will cope with missing projections by taking into account priors such as having a piecewise constant object with a very small number of phases. This strategy will be integrated in the alternating optimization process in order to improve the quality of the reconstructed object in spite of instrumental jitter.

REFERENCES

- [1] Kak, A. C. and Slaney, M., [*Principles of Computerized Tomographic Imaging*], IEEE Press (1988).
- [2] Frank, J., [*Electron tomography: methods for three-dimensional visualization of structures in the cell*], Springer (2006).
- [3] Ress, D., Harlow, M. L., Schwarz, M., Marshall, R. M., and McMahan, U. J., “Automatic acquisition of fiducial markers and alignment of images in tilt series for electron tomography,” *Journal of Electron Microscopy* **48**(3), 277–287 (1999).
- [4] Amat, F., Moussavi, F., Comolli, L. R., Elidan, G., Downing, K. H., and Horowitz, M., “Markov random field based automatic image alignment for electron tomography,” *Journal of Structural Biology* **161**(3), 260–275 (2008).
- [5] Brandt, S. S. and Ziese, U., “Automatic TEM image alignment by trifocal geometry,” *Journal of Microscopy* **222**(1), 1–14 (2006).

- [6] Sorzano, C. O. S., Messaoudi, C., Eibauer, M., Bilbao-Castro, J., Hegerl, R., Nickell, S., Marco, S., and Carazo, J., “Marker-free image registration of electron tomography tilt-series,” *BMC Bioinformatics* **10**(1), 124 (2009).
- [7] Frank, J. and McEwen, B. F., [*Alignment by cross-correlation*], 205–213, Plenum Press, New York (1992).
- [8] Gratadour, D., Mugnier, L. M., and Rouan, D., “Sub-pixel image registration with a maximum likelihood estimator. Application to the first adaptive optics observations of Arp 220 in the L’band,” *Astronomy & Astrophysics* **365**, 357–365 (2005).
- [9] Liu, Y., Penczek, P. A., McEwen, B. F., and Frank, J., “A marker-free alignment method for electron tomography,” *Ultramicroscopy* **58**(3-4), 393–402 (1995).
- [10] Tzimiropoulos, G., Argyriou, V., Zafeiriou, S., and Stathaki, T., “Robust FFT-based scale-invariant image registration with image gradients,” *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* **32**(10), 1899–1906 (2010).
- [11] Cop, M. and Dengler, J., “A multiresolution approach to the 3D reconstruction of a 50s ribosome from an EM-tilt series solving the alignment problem without gold particles,” *Proceedings 10th International Conference on Pattern Recognition* (1990).
- [12] Owen, C. H. and Landis, W. J., “Alignment of electron tomographic series by correlation without the use of gold particles,” *Ultramicroscopy* **63**(1), 27–38 (1996).
- [13] Winkler, H. and Taylor, K. A., “Accurate marker-free alignment with simultaneous geometry determination and reconstruction of tilt series in electron tomography,” *Ultramicroscopy* **106**(3), 13–23 (2000).
- [14] Houben, L. and Sadan, M. B., “Refinement procedure for the image alignment in high-resolution electron tomography,” *Ultramicroscopy* **111**(9-10), 1512–20 (2011).
- [15] Penczek, P. A., Grassucci, R. A., and Frank, J., “The ribosome at improved resolution: new techniques for merging and orientation refinement in 3D cryo-electron microscopy of biological particles,” *Ultramicroscopy* **53**(3), 251–270 (1994).
- [16] Yang, C., Ng, E. G., and Penczek, P. A., “Unified 3-D structure and projection orientation refinement using quasi-Newton algorithm,” *Journal of Structural Biology* **149**(1), 53–64 (2005).
- [17] Parkinson, D. Y., Knoechel, C., Yang, C., Larabell, C. A., and Le Gros, M. A., “Automatic alignment and reconstruction of images for soft X-ray tomography,” *Journal of Structural Biology* **177**(2), 259–66 (2012).
- [18] Tran, V. D., Moreaud, M., Thiébaud, É., Denis, L., and Becker, J. M., “Inverse problem approach for the alignment of electron tomographic series,” *to be published in Oil & Gas Science and Technology* (2013).
- [19] Nelder, J. A. and Mead, R., “A simplex method for function minimization,” *The Computer Journal* **7**(4), 308–313 (1965).
- [20] Lagarias, J. C., Reeds, J. A., Wright, M. H., and Wright, P. E., “Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions,” *SIAM Journal on Optimization* **9**(1), 112 (1998).
- [21] Thévenaz, P., Blu, T., and Unser, M., “Interpolation revisited,” *IEEE Transactions on Medical Imaging* **19**(7), 739–758 (2000).
- [22] Nocedal, J., “Updating quasi-Newton matrices with limited storage,” *Mathematics of Computation* **35**, 773–782 (1980).
- [23] Rudin, L., Osher, S., and Fatemi, E., “Nonlinear total variation based noise removal algorithms,” *Physica D: Nonlinear Phenomena* **60**(1-4), 259–268 (1992).
- [24] Momey, F., Denis, L., Mennessier, C., Thiébaud, É., Becker, J. M., and Desbat, L., “A new representation and projection model for tomography, based on separable B-splines,” *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, 2602–2609 (2011).
- [25] De Man, B. and Basu, S., “Distance-driven projection and backprojection in three dimensions,” *Physics in Medicine and Biology* **49**(11), 2463–2475 (2004).

Joint Reconstruction and Refined Registration for Electron Tomography

V.D. Tran^{1,3}, M. Moreaud¹, É. Thiébaud², L. Denis³ and J.M. Becker³

¹IFP Energies nouvelles, BP 3, 69360 Solaize, France

²Observatoire de Lyon, CRAL CNRS UMR 5574, Université de Lyon, France

³Laboratoire Hubert Curien, UMR CNRS 5516, Université de Saint-Etienne, France

Keywords: Robust registration; electron tomography; image reconstruction

ABSTRACT

We describe a new method for the alignment and tomographic reconstruction of transmission electron microscopy (TEM) images series without the need of fiducial markers. The proposed approach finely combines alignment and reconstruction jointly. An inverse problems approach to formalize the problem is used. Pre-registered projections, reducing strong shift between successive projections, are used to initialize an iterative alignment-refinement process which alternates between (i) volume reconstructions and (ii) registrations of measured projections onto simulated projections computed from the volume reconstructed in (i). The accuracy of our method is illustrated on simulated data.

1. INTRODUCTION

Electron tomography (EM) is a powerful characterization technique for the reconstruction of the 3D nanoscale structure of objects from a series of two-dimensional projections. A series of 2D TEM projections is acquired by tilting the specimen at various angles (usually in the range $\pm 70^\circ$, one projection every degree) around an axis perpendicular to the electron beam (see Figure 1).

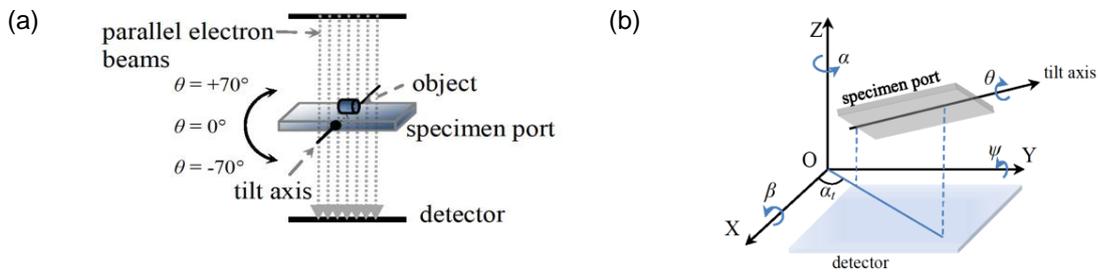


Figure 1: Data collection geometry in 3D reconstruction by TEM. (b) Tilt geometry: (X, Y, Z) coordinate system fixed. OZ is the optical axis. The OX, OY axes are parallel to the detector pixel rows and columns. The specimen port tilts about the tilt axis and angle θ . Due to mechanical imprecision, the specimen port may be shifted about X_t, Y_t, Z_t , and slightly tilted about β, ψ, α_t (along/around OX, OY, OZ respectively).

Reconstruction techniques require a precise alignment of the different projections. Because of mechanical imprecision and magnetic lenses defocus and magnification, neighboring projections may differ by a shift, a slight tilt and a change in magnification (Frank 2006). Currently, the most common alignment technique uses markers' tracking. We deal here with the case where no such markers are used for alignment. This case can be handled by cross-correlation methods (Frank and McEwen 1992) or 3D model-based methods (Cop and Dengler 1990, Houben and Sadan 2011). In this paper, we propose a new method without the need for fiducial markers, which recovers in an accurate manner the alignment parameters and produce a good quality reconstructed volume.

2. METHOD

2.1. Initial alignment

Prior to the general case (global alignment of M images), one needs to build an alignment method for 2

images. Four transformation parameters are required: horizontal and vertical translations, rotation and scaling. These parameters define how an image I_t to be registered is transformed into a reference image I_r . We propose a method that finds the parameters of the geometrical transformations by minimizing the mean squared error (MSE) between I_r and I_t :

$$\Delta\phi^* = \underset{\Delta\phi}{\operatorname{argmin}} E(\Delta\phi) \quad (1) \quad \text{with} \quad E(\Delta\phi) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [I_r(u_i) - (R_{\Delta\phi} \cdot I_t)(u_i)]^2$$

The u_i are the pixels' coordinates, $R_{\Delta\phi}$ is a linear operator which interpolates its argument in order to apply a geometrical transformation of the image specified by the parameters $\Delta\phi = (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta\varphi, \Delta s)$ corresponding respectively to the horizontal and vertical shifts of a translation, the angle of a rotation and the magnification scale. N is the number of pixels in the domain of interest (see Figure 2), which depends on $\Delta\phi$. In our application, $\Delta u_x \in [-W/2, W/2]$ and $\Delta u_y \in [-H/2, H/2]$ with W, H the width and height of the image, $\Delta\varphi$ does not exceed $\pm 2^\circ$ and Δs is in the range $\pm 1.0\%$.

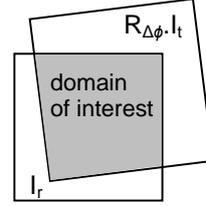


Figure 2: Domain of interest: intersection of two images.

We now turn to the case of a series of projections. The first image is chosen as the reference image. By applying our alignment method for two images, each image is aligned with the previous image in the series, thereby sequentially compensating image shifts throughout the entire series. Our proposed method is more robust than standard cross-correlation methods. For more details, refer to (Tran *et al.* 2013).

2.2. Joint reconstruction and refined registration

Typically, the tomography problem is represented by the relationship between the observed image (projections measurements) and the object to be reconstructed, which can be represented by the model:

$$I_t = H_{\phi_t} \cdot x + e_t \quad (2)$$

where I_t corresponds to tomographic projections, which is observed on the detector (for the t^{th} projection), x are the so-called voxels describing the object, H_{ϕ_t} a linear projection operator that characterizes how the projections are obtained from the object. The term e_t represents the errors due to the measurement noise and to the approximations of the model.

For the acquisition of the t^{th} projection, there are 6 orientation parameters ϕ_t with respect to the instrument (source + detector): three translational ones: X_t, Y_t, Z_t , and three rotational ones corresponding to three Euler angles $\beta_t, \psi_t, \alpha_t$ (see Figure 1(b)). Since the considered system performs parallel projections, by an adequate choice of the axes (two axes OX, OY aligned with the pixels of the detector and the third one, OZ in the normal direction), 2 terms of translation X_t, Y_t correspond to a translation of the projection; the third one, Z_t , has an impact on the magnification of the projection; the angle of rotation α_t (around OZ) corresponds to a simple rotation of the projection in the detector plane.

2.2.1. Solution of the inverse problem

The solution of the inverse problem is obtained by minimizing a cost function with respect to all voxels x and to all orientation parameters $\mathcal{G} = \{\phi_t\}_{t=1}^M$, where M is the number of projections:

$$\{x, \mathcal{G}\}^* = \underset{x, \mathcal{G}}{\operatorname{argmin}} f(x, \mathcal{G}) \quad (3)$$

For statistically independent measures, the cost function is given by:

$$f(x, \mathcal{G}) = \sum_{t=1}^M f_t(x, \phi_t) + f_{\text{prior}}(x) + \sum_{t=1}^M c_t(\phi_t) \quad (4)$$

with f_t the likelihood term of the t^{th} projection. For example, for a Gaussian noise:

$$f_t(\mathbf{x}, \phi) = (\mathbf{I}_t - \mathbf{H}_\phi \cdot \mathbf{x})^\top \cdot \mathbf{W}_t \cdot (\mathbf{I}_t - \mathbf{H}_\phi \cdot \mathbf{x})$$

where the weight matrix is the inverse of the covariance matrix of the noise: $\mathbf{W}_t = \text{Cov}(\mathbf{e}_t)^{-1}$. The function $f_{\text{prior}}(\mathbf{x})$ strengthens the priori on the voxels \mathbf{x} ; the functions $c_t(\phi_t)$ introduce knowledge (measured or apriori) on the orientation parameters. A direct resolution of the problem as given by Eqn. 3 is impractical because it depends on many heterogeneous parameters (voxels, translations and angles). Moreover, the cost function is multimodal. In principle, a global optimization method is necessary. We therefore split this difficult problem into sub-problems easier to solve and for which we have effective methods of resolution.

2.2.2. Alternating optimization

This method alternately estimates the voxels \mathbf{x} for given positioning parameters \mathcal{G} and then estimates the parameters \mathcal{G} for given voxels \mathbf{x} . This amounts to alternately perform volume reconstruction, and registration. As the voxels are considered fixed during the registration stage, each image can be registered independently (in parallel).

1. **Initialization.** Choose initial orientation parameters $\mathcal{G}^{[0]}$ and let $k = 0$.
2. **Reconstruction.** Estimate the voxels given the positioning parameters $\mathcal{G}^{[k]}$:

$$\mathbf{x}^{[k+1]} = \underset{\mathbf{x}}{\text{argminf}}(\mathbf{x}, \mathcal{G}^{[k]}) \quad (5)$$

3. **Alignment.** For each projection, seek the best positioning parameters, with fixed voxels $\mathbf{x}^{[k+1]}$:

$$\mathcal{G}^{[k+1]} = \underset{\mathcal{G}}{\text{argminf}}(\mathbf{x}^{[k+1]}, \mathcal{G})$$

For a separable cost function f like the one in Eqn. 5, the parameters ϕ_t associated with each projection are determined independently (that is, in parallel):

$$\phi_t^{[k+1]} = \underset{\phi_t}{\text{argminf}}_t(\mathbf{x}, \phi_t) + c_t(\phi_t) \quad (6)$$

Results are aggregated into: $\mathcal{G}^{[k+1]} = \left\{ \phi_t^{[k+1]} \right\}_{t=1}^M$

4. **Convergence test.** If the method has converged (e.g., the maximum magnitude of the translation alignment parameters is less than 1.0 pixels for two consecutive iterations), stop the iterations, otherwise increment k and return to step 2.

3. RESULTS

We suppose the case of one nanoparticle with single composition, embedded in a homogeneous support. Figure 3(a) shows a cross-section of the sample, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage. We create 142 simulated projections (256×256 pixels²) computed from -71° to $+70^\circ$, using angular steps of $+1^\circ$. To simulate misaligned images due to the displacements of the sample, each image in the series is randomly transformed: horizontal and vertical shifts amount of at most $\pm 30\%$ of image dimensions, slightly rotations (does not exceed $\pm 0.5^\circ$) and small magnification changes (in the range $\pm 1.0\%$). To make the simulation more realistic, Gaussian noise with zero mean and a standard deviation of $\sigma \leq 5.0$ pixels is added to each of the projection images.

The coarse alignment process (see Sec. 2.1) is applied on the simulation projection images to reduce strong shifts. From these pre-aligned projections, a first reconstructed volume is obtained by minimizing Eqn.5 with a Quasi-Newton optimization algorithm: the limited memory (L-BFGS) method (Nocedal 1980), combined with total-variation regularization (Rudin *et al.* 1992). We use an accurate numerical model of projection (projector) based on cubic B-splines (Momey *et al.* 2011), which provides much less approximation errors than standard distance driven projector (De Man and Basu 2004).

Fig. 3(b) shows a cross-section of the reconstructed volume corresponding to the cross-section shown in Fig. 3(a). The shape of the reconstructed particle is clearly distorted, due to the accumulation of errors in the coarse alignment process. This reconstructed volume is used to calculate simulated views, which are then considered as reference images, and are matched with each initial projection. This process is repeated, the quality of the reconstruction is improved considerably in few iterations. Fig. 3(c) shows the

cross-section of the reconstruction using 2 iterations of refined registration process. It is already very clear that the quality of the reconstruction has improved considerably. Only 6 iterations are necessary to archive a good reconstruction (see Fig. 3(d)), which is nearly perfect with respect to the original phantom. The quality improvement of the reconstructed volume for different iterations of alignment process is shown in Fig. 3(e). In the current implementation of the code, the time spent for a reconstruction by optimization using L-BFGS, is about 3 hours for a volume of $256 \times 256 \times 256$ voxels. This time can be reduced considerably by performing the reconstruction step by a standard reconstruction method as FBP, SIRT, ART, etc.; however, these methods cannot perform regularized reconstruction, which is necessary to reduce artefacts due to missing projections (limited angle geometry).

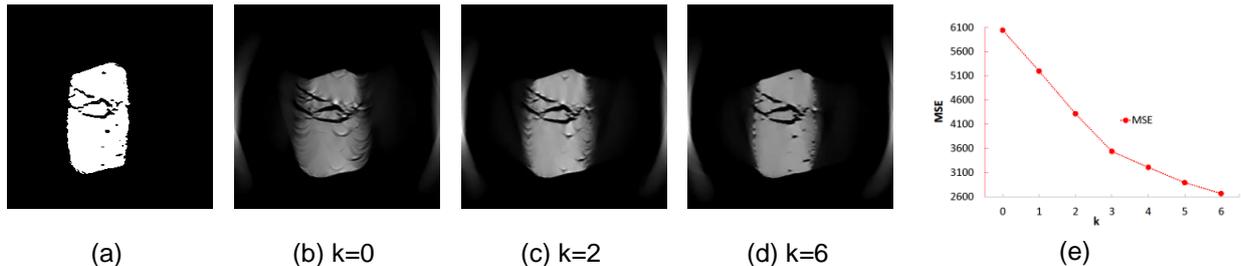


Figure 3. (a) Cross-section of the sample, orthogonal to the rotation axis of the tilt stage (original phantom). (b-d) cross-section of reconstructed volume for different iterations of refined registration process. (e) Values of MSE between the original phantom and the reconstructed volumes for different iterations.

4. CONCLUSION

An automatic robust registration and reconstruction method using an inverse problem approach has been presented. Our experimental results demonstrate that the proposed method yields accurate alignment and reconstruction for electron tomographic series without needing fiducial markers. We are now working on a strategy to cope with missing projections by taking into account priors such as having a piecewise constant object with a very limited number of phases. This strategy will be integrated in the alternating optimization process to improve the quality of the reconstructed object in spite of instrumental jitter.

5. REFERENCES

- Frank, J. (2006). *Electron tomography: methods for three-dimensional visualization of structures in the cell*, Springer.
- Frank, J. and McEwen, B. (1992). Alignment by cross-correlation, 205–213, Plenum Press.
- Cop, M. and Dengler, J. (1990). A multiresolution approach to the 3D reconstruction of a 50s ribosome from an EM-tilt series solving the alignment problem without gold particles, *Proceedings 10th International Conference on Pattern Recognition*.
- Owen, C. and Landis, W. (1996). Alignment of electron tomographic series by correlation without the use of gold particles, *Ultramicroscopy* 63(1), 27-38.
- Houben, L. and Sadan, M. B. (2011). Refinement procedure for the image alignment in high-resolution electron tomography, *Ultramicroscopy* 111(9-10), 1512–20.
- Tran, V.D., Moreaud, M., Thiébaud, É., Denis, L. and Becker, J.M. (2013). Inverse Problem Approach for the Alignment of Electron Tomographic series, to be published in *Oil & Gas Science and Technology*.
- Nocedal, J. (1980). Updating Quasi-Newton Matrices with Limited Storage. *Mathematics of Computation*, 35, 773-782.
- Rudin, L., Osher, S., and Fatemi, E. (1992). Nonlinear total variation based noise removal algorithms, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 60(1-4), 259-268.
- Momey, F., Denis, L., Mennessier, C., Thiebaut, E., Becker, J., and Desbat, L. (2011). A new representation and projection model for tomography, based on separable B-splines. *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, 2602–2609.
- De Man, B. and Basu, S. (2004). Distance-driven projection and backprojection in three dimensions. *Physics in Medicine and Biology*, 49(11), 2463-2475.

Résumé

Dans le domaine du raffinage, les mesures morphologiques de particules sont devenues indispensables pour caractériser les supports de catalyseurs. À travers ces paramètres, on peut remonter aux spécificités physico-chimiques des matériaux étudiés. Une des techniques d'acquisition utilisées est la tomographie électronique (ou nanotomographie). Des volumes 3D sont reconstruits à partir de séries de projections sous différents angles obtenues par microscopie électronique en transmission (MET). Cette technique permet d'acquérir une réelle information tridimensionnelle à l'échelle du nanomètre.

Les projections sont obtenues en utilisant les possibilités d'inclinaison du porte objet d'un MET. À cause des limitations mécaniques de ce porte objet (proximité avec les lentilles magnétiques et déplacement nanométrique), on ne peut acquérir qu'un nombre assez restreint de projections, celles-ci étant limitées à un intervalle angulaire fixe. D'autre part, l'inclinaison du porte objet est accompagnée d'un déplacement mécanique nanométrique non parfaitement contrôlé. Ces déplacements doivent être corrigés après l'acquisition par un alignement des projections suivant le même axe 3D de rotation. Cette étape est un pré-requis à la reconstruction tomographique.

Nous suggérons d'utiliser une méthode de reconstruction tomographique par une approche de type "problème inverse". Cette méthode permet d'aligner des projections et de corriger les lacunes de l'acquisition de l'objet observé en introduisant de façon pertinente des informations *a priori*. Ces informations sont donc basées à la fois sur la physique de l'acquisition (nature physique des images MET, géométrie et limitation spécifique de l'acquisition des projections, etc...) et sur la nature des objets à reconstruire (nombre et répartition des phases, critères morphologiques de type de connexité, etc...). L'algorithme proposé permet de réaliser la reconstruction nanotomographique avec une grande précision et un temps de calculs réduit considérablement par rapport à la technique classique. Nous avons testé avec succès notre méthode pour les projections réelles de différents supports de catalyseur.

Mots-clefs : traitement d'images, problème inverse, tomographie électronique, reconstruction 3D, alignement sans marqueurs, segmentation, déconvolution.

Abstract

In oil refining industry, morphological measurements of particles have become an essential part in the characterization of catalyst supports. Through these parameters, one can infer the specific physicochemical properties of the studied materials. One of the main acquisition techniques is electron tomography (or nanotomography). 3D volumes are reconstructed from sets of projections from different angles made by a transmission electron microscope (TEM). This technique provides a real three-dimensional information at the nanometric scale.

Projections are obtained by tilting the specimen port in the microscope. The tilt mechanism has two drawbacks : a rather limited angular range and mechanical shifts, which are difficult to deal with, knowing that these shifts must be corrected after the acquisition by an alignment of projections. This alignment step is a prerequisite for the tomographic reconstruction.

Our work deals with a wholly "inverse problem" approach for aligning projections and reducing artifacts due to missing projections by introducing in a relevant way certain *a priori* informations. These informations are jointly based on the physics of acquisition (physical nature of the TEM images, geometry and specific limitation on the acquisition of projections ...) and on the nature of objects to be reconstructed (number and distribution of phases, morphological criteria such as connectivity ...). This approach is described in an algorithmic way. The implementation of this algorithm shows higher precision reconstruction and smaller computation time compared to earlier techniques. We successfully tested our method for real projections of different catalyst supports.

Key words : image processing, inverse problem, electron tomography, 3D reconstruction, marker-free alignment, segmentation, deconvolution.

